

UNIWERSYTET MARII CURIE-SKŁODOWSKIEJ
Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki

Teoriogrupowa analiza wybranych dyskretnych grup symetrii wewnętrznych w kwadrupolowo-oktupolowym jądrowym modelu kolektywnym

Agnieszka Szulerecka

Praca doktorska wykonana w Katedrze Fizyki Teoretycznej
Instytutu Fizyki UMCS pod kierownictwem
prof. dr. hab. Andrzeja Góździa

Lublin 2018

**Składam serdeczne podziękowania
promotorowi
Panu Profesorowi Andrzejowi Góździowi
za pomoc otrzymaną podczas pisania tej pracy.**

Spis treści

1 Wstęp

Metody teoriogrupowe wykorzystywane są w wielu zagadnieniach fizycznych, gdzie pozwalają w dużym stopniu uprościć obliczenia, [1, 2]. Przykładem dziedziny, gdzie są one bardzo pomocne jest między innymi rozwiązywanie zagadnienia własnego hamiltonianu lub konstrukcji stanów własnych dla jądrowych modeli kolektywnych. Teoria grup była również wykorzystywana do opisu powierzchni jądrowych, które są niezmiennicze względem wybranych grup punktowych, [3, 4]. W tym przypadku dla wybranych grup tworzone były modele średniego pola dla jądra atomowego, opisanego za pomocą hamiltonianu jednocząstkowego Woodsa-Saxona. Na podstawie przeprowadzonych obliczeń powstała hipoteza istnienia jąder o symetrii innej niż sferyczna, osiowa lub elipsoidalna. Biorąc tę hipotezę po uwagę zaproponowano prosty kolektywny model wibracyjno-rotacyjny, dla którego zostały stworzone stany posiadające symetrię, która również opisywała powierzchnię jądrową. Korzystając z tych stanów zostały oszacowane wewnątrz i międzypasmowe przejścia elektryczne.

Zadaniem niniejszej pracy jest konstrukcja modeli jądrowych, w których stany opisane są przez funkcje posiadające pewne własności wynikające z grupy symetrii odpowiadającej wyborowi zmiennych kolektywnych opisujących powierzchnię jądrową. Chcąc uzyskać opis ruchu powierzchni jądra atomowego, w którym możemy osobno przedstawić ruch wibracyjny i rotacyjny, najwygodniej jest użyć układu wewnętrznego. Wykorzystanie takiego układu powoduje pytania dotyczące jednoznaczności przekształceń pomiędzy układem wewnętrznym a laboratoryjnym. Otrzymanie takiej transformacji wiąże się z pojawieniem grupy „symetrii", która następnie wykorzystywana jest do konstrukcji fizycznych stanów dla kolektywnego modelu kwadrupolowo-oktupolowo-rotacyjnego. Każdy z otrzymanych modeli jest próbą odtworzenia wyników eksperymentalnych otrzymanych dla ^{156}Gd, [5, 6].

W trakcie konstrukcji kolektywnych modeli istotną częścią było wykorzystywanie grup wewnętrznych, [7, 8], oraz stworzenie pewnych narzędzi, które umożliwiały ich wykorzystanie. Większość obliczeń była wykonana za pomocą programu Mathematica, w którym zostały napisane programy służące głównie do otrzymywania analitycznej postaci stanów posiadających określoną symetrię oraz do znalezienia wartości przejść wewnątrz i międzypasmowych.

Przedstawiona praca składa się z dwóch części: pierwsza zawierająca rozdziały 2-6 przedstawia główną tematykę, w której omówione są cele tej pracy, wykorzystywane metody oraz otrzymane wyniki. Drugą część stanową dodatkowe uzupełniające rozdziały A-H, w których znajdują się bardziej szczegółowe wyjaśnienia pojęć i wykorzystywanych metod.

Poniżej przedstawione są krótkie opisy poszczególnych rozdziałów: w drugim rozdziale omówione są przykłady wyboru układu wewnętrznego wykorzystywanego w opisie ruchu atomów w molekułach oraz jądra atomowego jakie można znaleźć w literaturze.

W rozdziale trzecim wprowadzone jest istotne pojęcie grupy symetryzacji $\overline{G}_s$, które później użyte jest do konstrukcji stanów fizycznych opisujących poziomy energetyczne dla wybranego jądra atomowego. Jak będzie pokazane grupa symetryzacji wynika z wyboru zmiennych wewnętrznych oraz z jednoznaczności transformacji pomiędzy układem laboratoryjnym i wewnętrznym. Przedstawione są też otrzymane grupy symetryzacji dla kilku wyborów zmiennych wewnętrznych kwadrupolowych lub/i oktupolowych.

W rozdziale czwartym rozważane są transformacje pomiędzy wybranymi zmiennymi wewnętrznymi. Pierwsza część tego rozdziału dotyczy istnienia i jednoznaczności transformacji pomiędzy układem wewnętrznym opisanym przez dwa różne zbiory zmiennych kwadrupolowych. W drugiej części zbiory kwadrupolowych zmiennych wewnętrznych rozszerzone są o zmienne oktupolowe.

W rozdziale piątym przedstawiona jest hipoteza istnienia jąder o wyższej symetrii punktowej, [3, 4]. Przedstawia on pierwsze próby rozstrzygnięcia prawdziwości tej hipotezy przez wykorzystywanie reprezentacji nieprzywiedlnych wybranych grupy symetrii. Rozdział ten jest również istotnym wstępem do dalszych rozdziałów, w których przedstawione są moje obliczenia.

Rozdział szósty zawiera opis konstrukcji oraz analizę otrzymanych wyników dla wibracyjno-rotacyjnego modelu kolektywnego. Ze względu na wybór współrzędnych wewnętrznych rozważane są dwa rodzaje modeli. Każdy z nich opisany jest przez inną grupę symetryzacji co wpływa na postać niskoleżących stanów opisujących widma energetycznego jądra atomowego ^{156}Gd. Dla otrzymanych modeli zostały również obliczone zredukowane prawdopodobieństwa przejść elektromagnetycznych wewnątrz i międzypasmowych. Podane wyniki otrzymywane zostały z napisanych programów w Mathematice.

W dodatkowych rozdziałach przedstawione są następujące zagadnienia: w dodatku A opisane są dokładniej grupy symetrii wykorzystywane do konstrukcji przedstawionych modeli, [9, 10, 11, 12]. Bardziej szczegółowo przedstawione są grupy O oraz $D_{4;y}$, dla których podane są nie tylko elementy, ale i wektory bazowe dla nieprzywiedlnych reprezentacji tych grup. Poza tym podane są tam charaktery, klasy oraz iloczyny Kroneckera. Dodatkowo zostały przedstawione elementy grup symetryzacji otrzymanych w rozdziale 3.

W dodatku B i C rozpisane są uzyskane funkcje bazowe opisujące rotacje oraz wibracje powierzchni jądrowej dla wybranych grup symetryzacji $\overline{O}$ i $\overline{D}_{4;y}$.

W dodatku D omówiona jest szerzej definicja rozkładu prawdopodobień-

stwa orientacji wektora momentu pędu dla otrzymanych funkcji bazowych dla modelu rzeczywistego. Pojęcie rozkładu prawdopodobieństwa orientacji wektora momentu pędu pojawiło się we wcześniejszych pracach doktorskich, [13, 14], a w tej pracy zostało ono przekształcone tak, aby było można wykorzystać je do analizy otrzymanych wyników opisanych za pomocą grupy wewnętrznej.

W dodatku E przedstawiony został rozkład prawdopodobieństwa funkcji bazowych dla grupy symetryzacji $\overline{D}_{4;y}$. Rozkład ten pokazuje z jakim prawdopodobieństwem funkcje bazowe dla modelu rzeczywistego wchodzą w skład danego stanu. Dzięki tej informacji można zobaczyć jakie wzbudzenia posiadają funkcje dające największy wkład w określony stan. Jest to dodatkowa informacja jaką można uzyskać na temat stanów składających się z sum wielu funkcji bazowych należących czasami do równoważnych nieprzywiedlnych reprezentacji różniących się wzbudzeniami.

Dodatek F zawiera dokładniejszy opis grupy $\overline{D}_{4;y}$, użytej do konstrukcji modelu rzeczywistego. Przedstawione są tam wyniki opisujące działanie tej grupy na rzeczywiste zmienne kolektywne oraz przedstawiają ciekawą własność dotyczącą parzystości, otrzymaną z działania tej grupy na funkcje oktupolowe.

W dodatku G został przedstawiony operator dipolowy i kwadrupolowy wykorzystywany do obliczeń zredukowanego prawdopodobieństw przejść wewnątrz i międzypasmowych. Kształt tych operatorów zależy od wyboru zmiennych wewnętrznych, więc również od grupy symetryzacji. Pokazany jest uzyskany rozkład omawianych operatorów na części opisane przez nieprzywiedlne reprezentacje grupy symetryzacji. Otrzymane wyniki okazały się przydatne podczas szukania reguł wyboru.

W ostatnim dodatku H pokazane są dokładnie postacie elementów macierzowych operatorów multipolowych wykorzystywanych do obliczeń zredukowanych prawdopodobieństw przejść między i wewnątrzpasmowych. Wyprowadzenie przedstawionych wzorów pozwoliło uprościć postać programów wykorzystywanych do obliczeń.

Część wyników opisanych w tej pracy przedstawiona jest w artykułach [15]-[20].

Praca ta została napisana podczas projektu unijnego „Programowa i strukturalna reforma systemu kształcenia na Wydziale Mat-Fiz-Inf".

2 Układy wewnętrzne

Pojęcie układu wewnętrznego wprowadzane jest w badaniach układów wielu ciał np. w fizyce molekularnej czy w opisie jąder atomowych. Jest to układ odniesienia, którego początek umieszcza się zazwyczaj w punkcie środka masy, a jego osie są np. osiami głównymi elipsoidy bezwładności ciała. Dodatkowo okazuje się, że energia kinetyczna w układzie wewnętrznym przyjmuje dość prostą formę. Niestety nie zawsze umożliwia to całkowite rozdzielenie członów opisujących różne rodzaje ruchów.

Istotnym zagadnieniem jest również opis przejścia pomiędzy układem laboratoryjnym i wewnętrznym. Ważną cechą takiej transformacji jest jednoznaczność. Niestety okazuje się, że czasami pomijany jest problem niejednoznaczności otrzymanych przekształceń pomiędzy dwoma wybranymi układami.

Niektórzy autorzy tłumaczą istnienie niejednoznaczności transformacji pomiędzy układami za pomocą permutacji nazw osi układu wewnętrznego. Przy takim podejściu liczba otrzymanych układów zależy od wymiaru przestrzeni, np. dla dwóch wymiarów mamy osiem możliwości wyboru osi, zaś dla trzech wymiarów jest ich już czterdzieści osiem. Podobnie jest z oznaczeniem cząstek, dla których uwględniane są wszystkie możliwe ich kombinacje. W takim przypadku rozwiązaniem jest ograniczenie się do jednego stałego oznaczenia osi układów lub cząstek. Takie podejście do problemu niejednoznaczności nie jest jednak związane z istnieniem symetrii w układzie wewnętrznym.

Poza przypadkami przedstawionymi powyżej próba konstrukcji jednoznacznego przekształcenia pomiędzy układami sprowadzona jest głównie do ograniczenia otrzymanej przestrzeni opisującej ruch w układzie wewnętrznym. Wówczas mogą pojawiać się pytania dotyczące działania tensorów przekształconych do układu wewnętrznego, dla których później została sztucznie ograniczona przestrzeń.

W dalszej części tego rozdziału opisanych jest kilka typowych przykładów układów wewnętrznych oraz konstrukcje zmiennych wewnętrznych służących do opisu ruchu układu N cząstek oraz jądra atomowego.

2.1 Przykłady wyboru osi układu wewnętrznego

Ogólną definicję układu wewnętrznego sztywno związanego z ciałem można znaleźć np. w [21], gdzie dla N cząstek o masach $m_1,\ m_2,\ \ldots, m_N$ i wektorach opisujących ich położenie w układzie laboratoryjnym $\vec{x}^1,\ \vec{x}^2, \ldots, \vec{x}^N$, tworzy go trójka prostopadłych do siebie wersorów $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$, będących funkcjami chwilowych położeń N cząstek, tzn. $\hat{f}_i = \hat{f}_i(\vec{x}^1, \ldots, \vec{x}^N),\ i = 1, 2, 3$ oraz

spełniających następujące warunki:

(i) $\hat{f}_i(\vec{x}^1 + \vec{a}, \ldots, \vec{x}^N + \vec{a}) = \hat{f}_i(\vec{x}^1, \ldots, \vec{x}^N)$, dla każdego wektora $\vec{a}$,

(ii) $\hat{f}_i(\mathcal{R}\vec{x}^1, \ldots, \mathcal{R}\vec{x}^N) = \mathcal{R}[\hat{f}_i(\vec{x}^1, \ldots, \vec{x}^N)]$, dla każdej rotacji $\mathcal{R}$,

(iii) $(\frac{\partial \hat{f}_i}{\partial x_1^n}, \frac{\partial \hat{f}_i}{\partial x_2^n}, \frac{\partial \hat{f}_i}{\partial x_3^n}) \neq (0, 0, 0)$, dla $n = 1, 2, \ldots, N$ i co najmniej jednego i.

Warunek (i) przedstawia niezmienniczość wersorów względem translacji, (ii) oznacza, że chwilowy obrót $\mathcal{R}$ wszystkich N cząstek powoduje, taką samą rotację wersorów $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$, (iii) zapewnia, że orientacja układu wewnętrznego zależy od chwilowego położenia każdej z N cząstek.

Inną możliwością utworzenia układu wewnętrznego jest wybranie jego osi, tak aby tensor bezwładności był w tym układzie diagonalny, [21]. W przypadku, gdy rozważamy N cząstek względem środka masy, w dowolnym układzie współrzędnych, postać tensora bezwładności jest następująca:

$$Q_{ij} = \sum_{n=1}^{N} m_n (x_i^n - R_i)(x_j^n - R_j), \; i, j = 1, 2, 3, \tag{1}$$

gdzie x_i^n jest współrzędną i wektora opisującego położenie cząstki o numerze n w układzie laboratoryjnym, a R_i jest współrzędną środka masy. Macierz Q jest nazywana również jako masowa macierz kwadrupolowa.

Macierz Q jest symetryczna, więc można ją zdiagonalizować za pomocą odpowiedniej ortogonalnej macierzy C:

$$C^{-1} Q C = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3). \tag{2}$$

Wówczas osie układu wewnętrznego $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$ można uzyskać z osi układu laboratoryjnego $(\hat{l}_1, \hat{l}_2, \hat{l}_3)$ używając przedstawionej wcześniej macierzy C:

$$\hat{f}_j = \sum_{i=1}^{3} C_{ij} \hat{l}_i. \tag{3}$$

Diagonalizacja macierzy związana jest z rozwiązaniem równania charakterystycznego. Otrzymane wektory własne określają osie nowego układu, które nazywane są głównymi osiami tensora bezwładności.

Innym przykładem wyboru osi układu wewnętrznego są osie uzyskane z ortogonalizacji Grama-Schmidta, [21]. Przyjmijmy, że mamy N cząstek, których położenie względem środka masy $\vec{R}$ opisują wektory $\vec{y}^n = \vec{x}^n - \vec{R}$, gdzie $\vec{x}^n$, $n = 1, \ldots, N$ są wektorami położeń cząstek w układzie laboratoryjnym. Wśród wszystkich cząstek, które nie leżą w jednej płaszczyźnie oraz na jednej

prostej, można wybrać trzy liniowo niezależne wektory $\vec{y}^i,\ i=1,2,3$. Chcąc otrzymać osie układu wewnętrznego wystarczy wybrane wektory zortogonalizować metodą Grama-Schmidta

$$\hat{f}_1 = \vec{y}^1\sqrt{D_1}, \tag{4}$$

$$\hat{f}_2 = \begin{vmatrix} \vec{y}^1\cdot\vec{y}^1 & \vec{y}^1\cdot\vec{y}^2 \\ \vec{y}^1 & \vec{y}^2 \end{vmatrix}\sqrt{D_1 D_2}, \tag{5}$$

$$\hat{f}_3 = \begin{vmatrix} \vec{y}^1\cdot\vec{y}^1 & \vec{y}^1\cdot\vec{y}^2 & \vec{y}^1\cdot\vec{y}^3 \\ \vec{y}^2\cdot\vec{y}^1 & \vec{y}^2\cdot\vec{y}^2 & \vec{y}^2\cdot\vec{y}^3 \\ \vec{y}^1 & \vec{y}^2 & \vec{y}^3 \end{vmatrix}\sqrt{D_1 D_2 D_3}, \tag{6}$$

gdzie $D_k,\ k=1,2,3$, jest k wymiarowym wyznacznikiem Grama.

Podaną metodę można również zastosować do dwóch liniowo niezależnych wektorów $\vec{y}^i,\ i=1,2$ otrzymując z nich, tak jak zostało to przedstawione powyżej, dwa wersory $\hat{f}_i,\ i=1,2$. Wówczas trzeci wersor określający układ wewnętrzny utworzony jest za pomocą iloczynu wektorowego, tzn. $\hat{f}_3 = \hat{f}_1 \times \hat{f}_2$.

2.2 Przykłady opisu ruchu w układzie wewnętrznym

Z wyborem układu wewnętrznego związana jest również konstrukcja zmiennych wewnętrznych. Zazwyczaj nowe zmienne wybierane są tak, aby opisywały cechy charakterystyczne ruchu. Również w tym przypadku może pojawić się problem niejednoznaczności.

W dalszej części przedstawionych jest kilka przykładów wyboru wewnętrznego układu współrzędnych oraz współrzędnych opisujących ruch w tym układzie.

Carl Eckart w [22, 23] pokazał, że dla molekuły składającej się z N atomów można znaleźć układ, w którym energia kinetyczna rozkłada się na człony odpowiadające za ruch rotacyjny całej molekuły oraz wibrację N atomów wokół punktów równowagi. Nowy układ, nazwany później układem Eckarta, określony jest przez osie powiązane z osiami głównymi dla chwilowej konfiguracji molekuły. Orientację układu Eckarta względem układu laboratoryjnego określają trzy kąty Eulera. Dokładny opis tego układu również można znaleźć np. w [21] oraz [24]. W dalszej części zostaną przedstawione wyniki przedstawione w [24].

Rozważmy molekułę, która składa się z N atomów. W układzie laboratoryjnym wektory położenia cząstki n oznaczmy przez $\vec{x}^{\,n}$, $n=1,2,\ldots,N$ a ich masę m_n.

Konstrukcja układu Eckarta dla chwilowej konfiguracji molekuły, składa się z dwóch części. Pierwszym krokiem jest umieszczenie w punkcie środka

masy osi głównych chwilowego położenia cząstek, a następnie ustala się położenie punktów równowagi, które opisują położenie cząstek dla sztywnej molekuły. Wybór tych punktów jest stały i nie zmienia się podczas ruchu cząstek. Wektory opisujące położenie poszczególnych punktów równowagi rozkładane są na współrzędne względem układu osi głównych a_i^n, $i = 1, 2, 3$. W ten sposób otrzymuje się tzw. model statyczny dla chwilowego położenia cząstek. Następnym krokiem jest utworzenie tzw. wektorów Eckarta

$$\vec{F}_i = \sum_n m_n a_i^n (\vec{x}^{\,n} - \vec{R}), \quad i = 1, 2, 3, \tag{7}$$

gdzie $\vec{R}$ jest wektorem środka masy molekuły w układzie laboratoryjnym. Korzystając z wektorów Eckarta, definiowane są wersory układu $\hat{f}_i$, $i = 1, 2, 3$. W przypadku nieliniowych i nieleżących w jednej płaszczyźnie molekuł definicja ta ma postać:

$$[\hat{f}_1 \hat{f}_2 \hat{f}_3] = [\vec{F}_1 \vec{F}_2 \vec{F}_3] G^{-\frac{1}{2}}, \tag{8}$$

gdzie wektor składający się z $\vec{F}_i$ mnożony jest przez dodatnio określoną macierz $G^{-\frac{1}{2}}$ oraz $G^{-\frac{1}{2}} G^{-\frac{1}{2}} = G^{-1}$, gdzie G^{-1} jest macierzą odwrotną do macierzy Grama G uzyskaną z wektorów Eckarta $G_{ij} = \vec{F}_i \cdot \vec{F}_j$. Wersory $\hat{f}_i$, $i = 1, 2, 3$ tworzące ten układ nazywane są układem Eckarta.

Relacja pomiędzy wersorami $\hat{f}_i$ oraz wektorami Eckarta $\vec{F}_i$ określona jest przez równość:

$$\hat{f}_1 \times \vec{F}_1 + \hat{f}_2 \times \vec{F}_2 + \hat{f}_3 \times \vec{F}_3 = \vec{0}. \tag{9}$$

Następnym krokiem jest ustawienie układu Eckarta w chwilowym punkcie środka masy, tak by zgadzał się z osiami głównymi otrzymanymi w modelu statycznym.

Przy takiej konstrukcji wektory położeń punktów równowagi N cząstek w układzie Eckarta są stałe:

$$\vec{u}^{\,n} = a_1^n \hat{f}_1 + a_2^n \hat{f}_2 + a_3^n \hat{f}_3. \tag{10}$$

Transformacja z układu laboratoryjnego do układu Eckarta ma postać:

$$\vec{x}^{\,n} = \vec{R} + \vec{u}^{\,n} + \vec{\rho}^{\,n}, \tag{11}$$

gdzie $\vec{u}^{\,n} = a_1^n \hat{f}_1 + a_2^n \hat{f}_2 + a_3^n \hat{f}_3$ jest wektorem opisującym położenie punktu równowagi dla atomu n ($n = 1, 2, \cdots, N$) w układzie Eckarta, a wektor $\vec{\rho}^{\,n}$ określa położenie atomu n względem punktu równowagi. Wektory $\vec{u}^{\,n} = \sum_i a_i^n \hat{f}_i$ są stałe, zatem współrzędne wewnętrzne opisujące molekułę są współrzędnymi wektorów $\vec{\rho}^{\,n}$. Ponieważ położenie układu wewnętrznego opisane

jest za pomocą współrzędnych środka masy molekuły oraz kątów Eulera, zatem jest $3N-6$ niezależnych współrzędnych wewnętrznych opisujących ruch w układzie Eckarta. Warunki, określające $\vec{\rho}$ mają postać:

$$\textstyle\sum_n m_n \vec{\rho}^{\,n} = 0, \quad i = 1,2,3, \; n = 1,2,\ldots,N, \tag{12}$$

$$\textstyle\sum_n m_n \vec{u}^{\,n} \times \vec{\rho}^{\,n} = \vec{0}. \tag{13}$$

Równanie (12) opisuje położenie środka masy dla punktów równowagi molekuły i jest później nazwane przez autora warunkiem środka masy. Wzór (13) jest warunkiem wyprowadzonym przez Eckarta.

Autorzy wzięli pod uwagę możliwość niejednoznaczności wyboru układu wynikającego z permutacji nazw cząstek i osi układu. Zauważyli, że dla różnych oznaczeń cząstek oraz wyboru osi głównych otrzymuje się różne układy Eckarta, co wynika z opisu punktów równowagi w układzie osi głównych. Przy jednoznacznym określeniu cząstek oraz osi głównych układ wewnętrzny jest wybrany jednoznacznie.

W dalszych rozważaniach opisujących wybrane własności układu Eckarta potrzebne jest używane przez autorów pojęcie identycznych cząstek, czyli takich które mają taką samą masę oraz ładunek.

Dla takich cząstek można przedstawić transformację między układami Eckarta, utworzonymi przy innych wyborach osi głównych i oznaczeń cząstek. Jednoznaczne odwzorowanie pomiędzy wszystkimi opisami układów związane jest z niezmienniczością wektorów Eckarta $\vec{F}_i = \sum_n m_n a_i^n \vec{x}^{\,n}$. Przekształcenia, które nie zmieniają ich postaci są to transformacje współrzędnych wektorów punktów równowagi:

$$a_i^n \to \sum_{n'} a_i^{n'} S_{n'n} \tag{14}$$

oraz wektorów położeń cząstek

$$\vec{x} \to \sum_{n'} \vec{x}^{\,n'} S_{n'n}, \tag{15}$$

gdzie S jest dowolną macierzą ortogonalną komutująca z macierzą mas:

$$M = \begin{pmatrix} m_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & m_2 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & m_N \end{pmatrix}. \tag{16}$$

Istnieją również inne przekształcenia współrzędnych, które nie zmieniają układu Eckarta. Przyjmijmy, że wektory $\vec{x}^{\,n} = \vec{u}^{\,n} + \vec{\rho}^{\,n}$, $n = 1,2,\cdots,N$

opisują położenie cząstek w układzie Eckarta mającym początek w punkcie środka masy. Transformacje, które zachowują środek masy oraz układ Eckarta mają postać $\vec{y}^{\,n} = \vec{u}^{\,n} + \vec{\eta}^{\,n}$, oraz

$$\vec{\eta}^{\,n} = \textstyle\sum_{n'}(B\vec{\rho}^{\,n})S_{nn'},\ n = 1, 2, \cdots, N, \tag{17}$$

$$B\vec{\rho}^{\,n} = \textstyle\sum_{i,j} B_{ij}(\vec{\rho}^{\,n} \cdot \hat{f}_j)\hat{f}_i, \tag{18}$$

gdzie R jest macierzą ortogonalną, S jest przedstawiona za pomocą macierzy permutacji S_λ identycznych cząstek:

$$S = \begin{pmatrix} S_a & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & S_b & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & S_d \end{pmatrix}. \tag{19}$$

Przy czym zachodzi równość $BA = AB$, dla macierzy A składającej się ze współrzędnych wektorów opisujących położenie punktów równowagi molekuły $\vec{u}^{\,n} = \sum_i a_i^n \hat{f}_i,\ i = 1, 2, 3$, tj.:

$$A = \begin{pmatrix} a_1^1 & a_1^2 & \cdots & a_1^N \\ a_2^1 & a_2^2 & \cdots & a_2^N \\ a_3^1 & a_3^2 & \cdots & a_3^N \end{pmatrix}. \tag{20}$$

Inny opis współrzędnych wewnętrznych przedstawiony jest w [25], [26], gdzie W. Zickendraht przedstawił go najpierw dla układu trzech ciał. Następnie w [27] opisał je dla czterech cząstek, a w [28] uogólnił przejście do nowego układu dla N cząstek. Podobnie jak we wcześniejszych artykułach za początek układu wewnętrznego przyjął środek masy, w którym wprowadził wektory Jacobiego.

Dla trzech ciał nowe współrzędne składały się z trzech kątów Eulera (ϕ, θ, φ), określających orientację układu osi głównych względem układu laboratoryjnego, oraz trzech współrzędnych wewnętrznych α, β, y. W [26] autor dokładnie opisał przejście do nowych współrzędnych oraz zauważył, że przedstawiona transformacja nie jest jednoznaczna, gdy dwa główne momenty bezwładności są równe. Uwzględnił również tę wieloznaczność przy tworzeniu funkcji falowej, żądając aby była ona niezmiennicza względem tej transformacji.

W [28] dla czterech cząstek mamy trzy wektory Jacobiego $\vec{x}^{\,i},\ i = 1, 2, 3$:

$$\begin{aligned} \vec{x}^{\,1} &= (\vec{r}^{\,1} + \vec{r}^{\,2} - \vec{r}^{\,3} - \vec{r}^{\,4})/2, \\ \vec{x}^{\,2} &= (\vec{r}^{\,1} - \vec{r}^{\,2} + \vec{r}^{\,3} - \vec{r}^{\,4})/2, \\ \vec{x}^{\,3} &= (\vec{r}^{\,1} - \vec{r}^{\,2} - \vec{r}^{\,3} + \vec{r}^{\,4})/2, \end{aligned} \tag{21}$$

gdzie wektory $\vec{r}^{\,i}$, $i = 1, 2, 3, 4$ opisują położenie atomów względem środka układu współrzędnych. Autor przedstawił je za pomocą trzech zewnętrznych kątów Eulera (ϕ, θ, φ), trzech zmiennych y^1, y^2, y^3, oraz trzech wewnętrznych kątów Eulera, (α, β, γ). Współrzędne $y^1, y^2, y^3, \phi, \theta, \varphi$ określają położenie oraz rozmiar elipsoidy bezwładności. W [28] związek pomiędzy nowymi współrzędnymi a wektorami Jacobiego przedstawił następująco:

$$\begin{pmatrix} x_1^1 & x_2^1 & x_3^1 \\ x_1^2 & x_2^2 & x_3^2 \\ x_1^3 & x_2^3 & x_3^3 \end{pmatrix} = \mathcal{R}^{'}(\alpha, \beta, \gamma) \begin{pmatrix} y^1 & 0 & 0 \\ 0 & y^2 & 0 \\ 0 & 0 & y^3 \end{pmatrix} \mathcal{R}(\phi, \theta, \varphi), \tag{22}$$

gdzie x_k^i, $i, k = 1, 2, 3$ oznaczają k-tą współrzędną wektora Jacobiego o numerze i, y^i jest długością wektora $\vec{y}^{\,i}$, $\mathcal{R}^{'}(\alpha, \beta, \gamma)$ i $\mathcal{R}(\phi, \theta, \varphi)$ są macierzami obrotu opisanymi odpowiednio przez kąty (α, β, γ) i (ϕ, θ, φ). Wektory $\vec{y}^{\,i}$, $i = 1, 2, 3$ tworzące nowy układ odpowiadają wierszom iloczynu macierzy:

$$\begin{pmatrix} y^1 & 0 & 0 \\ 0 & y^2 & 0 \\ 0 & 0 & y^3 \end{pmatrix} \mathcal{R}(\phi, \theta, \varphi). \tag{23}$$

Tak otrzymaną transformację można więc zapisać w postaci:

$$\vec{x}^{\,i} = a_1^i \vec{y}^{\,1} + a_2^i \vec{y}^{\,2} + a_3^i \vec{y}^{\,3}, \tag{24}$$

gdzie spełnione są warunki:

$$\vec{y}^{\,i} \vec{y}^{\,k} = y^i y^k \delta_{ik}, \; i, k = 1, 2, 3, \tag{25}$$

$$\textstyle\sum_{i=1}^{3} a_j^i a_k^i = \delta_{jk}. \tag{26}$$

W przypadku, gdy mamy ustalone wektory $\vec{y}^{\,i}$, $i = 1, 2, 3$, orientację oraz moment bezwładności, wówczas a_j^i opisują pozostałe stopnie swobody.

Podana powyżej transformacja może być uogólniona dla N cząstek i ma ona postać, [28]:

$$\vec{x}^{\,i} = a_1^i \vec{y}^{\,1} + a_2^i \vec{y}^{\,2} + a_3^i \vec{y}^{\,3}, \tag{27}$$

gdzie spełnione są warunki:

$$\vec{y}^{\,i} \vec{y}^{\,k} = y^i y^k \delta_{ik}, \; i, k = 1, 2, 3, \tag{28}$$

$$\textstyle\sum_{i=1}^{N-1} a_j^i a_k^i = \delta_{jk}. \tag{29}$$

Wektory $\vec{y}^{\,i}$ odpowiadają osiom układu wewnętrznego i mają kierunki osi elipsoidy bezwładności, a momenty bezwładności mogą być zapisane za pomocą y^i w postaci:

$$J_1 = m\left((y^2)^2 + (y^3)^2\right), \tag{30}$$

$$J_2 = m\left((y^3)^2 + (y^1)^2\right), \tag{31}$$

$$J_3 = m\left((y^1)^2 + (y^2)^2\right). \tag{32}$$

W przypadku, gdy rozważamy układ o początku w punkcie środka masy, wówczas możemy zapisać $N-1$ wektorów Jacobiego następująco:

$$\begin{aligned} \vec{x}^{\,1} &= [\vec{r}^{\,1} - \vec{r}^{\,2}]/\sqrt{2}, \\ \vec{x}^{\,2} &= [\vec{r}^{\,1} + \vec{r}^{\,2} - 2\vec{r}^{\,3}]/\sqrt{6}, \\ &\vdots \\ \vec{x}^{\,N-1} &= [\vec{r}^{\,1} + \vec{r}^{\,2} + \cdots + \vec{r}^{\,N-1} - (N-1)\vec{r}^{\,N}]/\sqrt{N(N-1)}, \end{aligned} \tag{33}$$

gdzie $\vec{r}^{\,i}$, $i = 1, \cdots, N$ są wektorami położenia cząstek względem punktu środka masy.

Wektory $\vec{y}^{\,i}$ albo sześć zmiennych, przedstawionych powyżej, y_1, y_2, y_3, φ, ψ, θ są przez autora nazwane kolektywnymi współrzędnymi. Opisują one parametry oraz orientację w układzie laboratoryjnym elipsoidy bezwładności. Pozostałe zmienne, a_{i1}, a_{i2}, a_{i3}, w równaniu (27) nazywane są zmiennymi wewnętrznymi. Z warunku (29) widać, że tylko $3N-9$ zmiennych wewnętrznych a_{ik} $(k = 1, 2, 3)$ można wybrać niezależnie.

Ponieważ wektory Jacobiego nie są wygodnie przy opisie identycznych cząstek, można zastąpić je wektorami wodzącymi $\vec{r}^{\,i}$ opisującymi położenie cząstek w układzie o początku w punkcie środka masy. Wówczas, podobnie jak dla wektorów Jacobiego, można je zapisać w układzie wewnętrznym jako:

$$\vec{r}^{\,i} = s_1^i \vec{y}^{\,1} + s_2^i \vec{y}^{\,2} + s_3^i \vec{y}^{\,3}, \tag{34}$$

gdzie spełnione są warunki:

$$\sum_{i=1}^{N} s_j^i = 0, \tag{35}$$

$$\sum_{i=1}^{N} s_j^i s_k^i = \delta_{jk}. \tag{36}$$

Również w tym zapisie tylko $3N-9$ ze współrzędnych s_{ij} można wybrać niezależnie.

W [29, 30, 31] został przedstawiony inny układ współrzędnych, który przez autorów został nazwany symetrycznym układem współrzędnych. Na początku służył on do opisu zderzeń trzech cząstek oraz oddziaływań pomiędzy nimi. Współrzędne wprowadzone w przedstawionych artykułach są jedną z możliwości wyboru współrzędnych nazwanych hipersferycznymi.

Podobnie jak we wcześniejszych rozważaniach, układ ten posiada początek w punkcie środka masy. W [29] współrzędne hipersferyczne zostały wprowadzone następująco: niech $\vec{x}^{\,k}, k = 1, 2, 3$ oznaczają wektory określające

położenie k-tej cząstki, $x_i^k, i = 1,2,3$ jej współrzędne kartezjańskie, m_k jej masę. Znormalizowane wektory Jacobiego utworzone z wektorów $\vec{x}^{\,k}$ mają postać:

$$ {}_t\xi_i^1 = d_t^{-1}(x_i^{t+2} - x_i^{t+1}), \tag{37}$$
$$ {}_t\xi_i^2 = d_t[x_i^t - (t_{t+1} + t_{t+2})^{-1}(t_{t+1}x_i^{t+1} + t_{t+2}x_i^{t+2})], \tag{38}$$
$$ X_i = \sum_{k=1}^3 \frac{t_k}{M} x_i^k, \tag{39}$$

gdzie M oznacza całkowitą masę, indeks t przy ξ określa kolejność łączenia cząstek, wektor ${}_t\vec{\xi}^{\,1}$ jest wektorem względnym między dwiema cząstkami i, j dla których $i, j \neq t$, a ${}_t\vec{\xi}^{\,2}$ jest wektorem poprowadzonym ze środka masy dwóch wektorów i, j do cząstki oznaczonej przez t. $d_k^2, k = 1,2,3$ jest stałą normalizacji, która zależy od zredukowanej masy μ:

$$\begin{aligned} M &= m_1 + m_2 + m_3, \\ \mu^2 &= m_1 m_2 m_3 / M, \\ d_k^2 &= \tfrac{m_k}{\mu}(1 - \tfrac{m_k}{M}). \end{aligned} \tag{40}$$

Współrzędne środka masy X_i można oddzielić od równań ruchu i dalej ich nie używać. Równania (37), (38) określają trzy różne zbiory względnych współrzędnych trzech cząstek w zależności od wartości $m = 1,2,3$. Współrzędne te są szczególnie wygodne do opisu trzech cząstek, gdzie cząstki i, j znajdują się bliżej siebie niż cząstka k. Transformację opisującą przejście pomiędzy różnymi zbiorami podanych wyżej współrzędnych, $\{{}_j\xi^1\}$ i $\{{}_j\xi^2\}$, można opisać za pomocą rozwartych kątów β_{ij}. Poniżej składowe współrzędnych $\{{}_j\xi^1\}$ i $\{{}_j\xi^2\}$ są oznaczone za pomocą indeksu k:

$$\begin{pmatrix} {}_j\xi_k^1 \\ {}_j\xi_k^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\beta_{ij} & \sin\beta_{ij} \\ -\sin\beta_{ij} & \cos\beta_{ij} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} {}_i\xi_k^1 \\ {}_i\xi_k^2 \end{pmatrix}, \quad k = 1,2,3. \tag{41}$$

Kąty β_{ij} zależą od mas cząstek i spełniają następujące własności:

$$\begin{aligned} \beta_{ij} = -\beta_{ji}, \;\; \beta_{ii} = 0, \;\; \operatorname{tg}\beta_{ij} &= \tfrac{-m_k}{\mu}, \\ d_i d_j \sin\beta_{ij} = 1, \;\; d_i d_j m_k \cos\beta_{ij} &= -\mu, \\ \beta_{12} + \beta_{23} + \beta_{31} &= 2\pi. \end{aligned} \tag{42}$$

Powyższa transformacja nazywana jest kinematyczną rotacją o kąt β_{ij}. Nie jest to zwykły obrót w przestrzeni, tylko określa on przejście pomiędzy dwoma równoważnymi opisami trzech cząstek.

Będąc w układzie środka masy potrzeba sześciu zmiennych do opisu trzech cząstek, można więc przejść do 6-cio wymiarowego układu współrzędnych hipersferycznych. Nowe współrzędne podzielone są na dwa rodzaje: zewnętrzne

oraz wewnętrzne. Współrzędne zewnętrzne określają orientację układu obracającego się względem ustalonego układu laboratoryjnego i są to trzy kąty Eulera α, β, γ. Osie układu wewnętrznego wybrane są tak, aby pokrywały się z osiami głównymi bezwładności. W dalszej części przedstawiony jest schemat wyboru tych współrzędnych, [29, 31].

Na początku wybierany jest jeden ze zbiorów wektorów Jacobiego, ustalając $t = 1, 2, 3$. Następnie dla układu trzech cząstek można utworzyć wektor $\vec{A} = \frac{1}{2}({}_t\xi^1 \times {}_t\xi^2)$. Długość tego wektora $A = |\vec{A}|$ jest polem trójkąta utworzonego przez trzy cząstki. Wektor $\vec{A}$ opisany jest przez współrzędne sferyczne w układzie laboratoryjnym: A, θ_A, ϕ_A.

Przejście do układu wewnętrznego odbywa się w dwóch krokach. Układ laboratoryjny obracany jest zgodnie z kątami Eulera $\alpha = \phi_A, \beta = \theta_A, \gamma = 0$. Oś OZ układu pośredniego jest prostopadła do płaszczyzny wyznaczonej przez trzy cząstki i ma kierunek zgodny z kierunkiem wektora $\vec{A}$. W kolejnym kroku układ obracany jest o kąt γ wokół osi OZ układu pośredniego, tak żeby osie układu pośredniego były jednocześnie osiami głównymi momentu bezwładności rozważanych trzech cząstek.

Aby znaleźć kąt γ zostały wprowadzone wielkości skalarne s i t określone przez moment bezwładności na płaszczyźnie wyznaczonej przez cząstki, [29, 31]:

$$s = (I_y - I_x)/\mu, \tag{43}$$

$$t = 2I_{xy}/\mu. \tag{44}$$

W układzie pośrednim mają one postać:

$$s = ({}_j\xi_1^1)^2 + ({}_j\xi_2^1)^2 - ({}_j\xi_1^2)^2 - ({}_j\xi_2^2)^2, \tag{45}$$

$$t = 2({}_j\xi_1^1 {}_j\xi_1^2 + {}_j\xi_2^1 {}_j\xi_2^2). \tag{46}$$

Układ pośredni obracamy o kąt γ względem osi OZ, tak aby jego osie pokrywały się z osiami głównymi. Przy takim obrocie wielkości s i t transformują się jakby były współrzędnymi wektora obracanego o kąt 2γ:

$$s' = s\cos(2\gamma) + t\sin(2\gamma), \tag{47}$$

$$t' = -s\sin(2\gamma) + t\cos(2\gamma), \tag{48}$$

gdzie s', t' są już w układzie wewnętrznym. Znając s, t w układzie pośrednim oraz wiedząc, że w układzie wewnętrznym $t' = 0$ można wyznaczyć kąt γ:

$$\cos(2\gamma) = s/Q, \tag{49}$$

$$\sin(2\gamma) = t/Q, \tag{50}$$

gdzie $Q = \sqrt{s^2 + t^2}$ jest niezmieniczy względem opisanych obrotów. Ponieważ kąt $\gamma \in [0, 2\pi)$, więc otrzymuje się dwie wartości: $\gamma_1 \in [0, \pi)$ oraz $\gamma_2 = \gamma_1 + \pi$. Dodatkowo można ustalić oznaczenie osi układu wewnętrznego w płaszczyźnie, w której leżą cząstki tak, że oś OX oznaczona jest dla mniejszego momentu bezwładności a OY dla większego.

Do pełnego opisu cząstek w układzie wewnętrznym potrzebne są trzy współrzędne wewnętrzne: dwa kąty θ, ϕ^j oraz promień hipersferyczny $\rho = ({}_j\xi^1_{w1})^2 + ({}_j\xi^1_{w2})^2 + ({}_j\xi^2_{w1})^2 + ({}_j\xi^2_{w2})^2$, gdzie indeks w oznacza współrzędne wektorów Jacobiego zapisanych w układzie wewnętrznym.

Wektory Jacobiego we współrzędnych wewnętrznych mają postać:

$$\begin{aligned} {}_j\xi^1_{w1} &= \rho\cos(\theta)\cos(\phi^j), \\ {}_j\xi^1_{w2} &= -\rho\sin(\theta)\sin(\phi^j), \\ {}_j\xi^2_{w1} &= \rho\cos(\theta)\sin(\phi^j), \\ {}_j\xi^2_{w2} &= \rho\sin(\theta)\cos(\phi^j). \end{aligned} \tag{51}$$

Kąt θ można uzyskać z jednego z równań:

$$\cos(2\theta) = \frac{Q}{\rho^2}, \tag{52}$$

$$\sin(2\theta) = \frac{4A}{\rho^2}, \tag{53}$$

gdzie $Q = ({}_j\xi^1_{w1})^2 + ({}_j\xi^1_{w2})^2 - ({}_j\xi^2_{w1})^2 - ({}_j\xi^2_{w2})^2$, $A = \frac{1}{2}({}_j\xi^1_1 {}_j\xi^2_2 - {}_j\xi^1_2 {}_j\xi^2_1)$ jest długością wektora $\vec{A}$ w układzie wewnętrznym. Ze względu na nieujemne wartości ρ, A, Q otrzymuje się, że $\theta \in [0, \frac{\pi}{4}]$.

Drugi kąt ϕ^j zależy od wyboru wektorów Jacobiego. Kąt ten można otrzymać z równości:

$$\cos(2\phi^j) = \frac{|{}_j\xi^1|^2 - |{}_j\xi^2|^2}{Q}, \tag{54}$$

$$\sin(2\phi^j) = \frac{2{}_j\xi^1 \cdot {}_j\xi^2}{Q}. \tag{55}$$

Ponieważ $|{}_j\xi^1|^2 - |{}_j\xi^2|^2$ oraz ${}_j\xi^1 \cdot {}_j\xi^2$ są skalarami, więc można je wyliczyć albo w układzie laboratoryjnym albo wewnętrznym. Dla dwóch różnych wyborów wektorów Jacobiego $\{{}_j\xi\}$ i $\{{}_i\xi\}$ istnieje związek pomiędzy kątami od których zależą: $\phi^j = \phi^i - \beta_{ij}$, co odpowiada kinematycznym rotacjom w układzie wewnętrznym, opisującym przejście do nowej bazy.

Ponieważ $\phi^j \in [0, 2\pi)$, więc można uzyskać dwie jego wartości: $\phi^j_a \in [0, \pi)$ oraz $\phi^j_b = \phi^j_a + \pi$, podobnie jak dla γ. Zgodnie z [31] są dwa układy wewnętrzne różniące się kątami ϕ^j i każdemu odpowiada określony kąt Eulera

γ. Aby wyznaczyć kąty γ i ϕ^j odpowiadające temu samemu układowi ustala się kąt $\gamma = \gamma_1$, a następnie w (51) wstawiany jest ϕ_a^j. Jeśli uzyskamy wektor początkowy, wówczas dwa układy określone są odpowiednio dla $(\gamma_1,\ \phi_a^j)$ i $(\gamma_2,\ \phi_b^j)$. W przeciwnym wypadku mamy pary kątów: $(\gamma_1,\ \phi_b^j)$ i $(\gamma_2,\ \phi_a^j)$. Widać zatem, że każda konfiguracja trzech cząstek może być przedstawiona na dwa sposoby. Promień hipersferyczny ρ jest niezmienniczy względem rotacji i jest proporcjonalny do momentu bezwładności wzdłuż osi prostopadłej do płaszczyzny, w której leżą cząstki. Niestety w [29] nic nie jest wspomniane o jednoznaczności przejścia pomiędzy układami, dopiero w [31] rozpatrywane są możliwości otrzymania różnych układów wewnętrznych ze względu na wartości kątów opisujących transformacje pomiędzy układami.

Inne możliwości wyboru współrzędnych hipersferycznych można znaleźć w [31] oraz w [32], gdzie między innymi wprowadzone są kwaterniony.

Współrzędne hipersferyczne można uogólnić dla N cząstek, gdzie mamy hiperpromień oraz $N-1$ kątów, których wybór nie jest jednoznaczny. Przykład wykorzystania podanych współrzędnych można znaleźć między innymi w [33].

W dalszej części przedstawione są dwa inne sposoby opisu ruchu N cząstek. Pierwszy z nich dotyczy zastosowania tzw. diad, a drugi gładkich krzywych transwersalnych. W obu przypadkach mamy podział na podprzestrzenie opisujące różne rodzaje ruchów.

W [34] autorzy rozważyli N identycznych nukleonów lub cząstek o masach M, których współrzędne przedstawili za pomocą pojęcia diady, ([34, 35]). Diada zdefiniowana jest jako skończona suma formalnych iloczynów dwóch wektorów $\mathbf{d} = \sum_i \vec{A}^i \vec{B}^i$ (w zapisie Diracowskim odpowiada postaci $\mathbf{d} = \sum_i |A^i\rangle\langle B^i|$). Mnożenie lewo i prawostronne przez wektor określone jest następująco:

$$\vec{F} \cdot \mathbf{d} = \sum_i (\vec{F} \cdot \vec{A}^i)\vec{B}^i, \tag{56}$$

$$\mathbf{d} \cdot \vec{G} = \sum_i \vec{A}^i(\vec{B}^i \cdot \vec{G}), \tag{57}$$

gdzie $(\vec{F} \cdot \vec{A}^i), (\vec{B}^i \cdot \vec{G})$ są iloczynami skalarnymi wektorów. Diady można traktować jako operatory działające na wektory z prawej lub lewej strony przekształcające jedną przestrzeń, w której leżą wektory, w drugą.

Diadę $\mathbf{d}$ można również przedstawić jako macierz $n \times m$ wymiarową, gdzie wektor $\vec{A}^i$ jest n wymiarowy, $\vec{B}^i$ ma wymiar m, a element macierzowy ma postać:

$$d_{pr} = \sum_i A_p^i B_r^i, \tag{58}$$

gdzie p i r określają odpowiednio wektor bazowy w przestrzeni m i n wymiarowej.

Przyjmując, że wektory $\vec{x}^{\,n}$, $n = 1, \cdots, N$ określają położenie N cząstek, $\vec{R} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \vec{x}^{\,n}$ jest środkiem masy układu, można zdefiniować diadę składającą się z wektorów położeń cząstek $\vec{r}^{\,n} = \vec{x}^{\,n} - \vec{R}$:

$$\mathbf{D} = \sum_{n=1}^{N} \vec{c}^{\,n} \vec{r}^{\,n}, \tag{59}$$

gdzie $\vec{c}^{\,n}$ tworzą zbiór ustalonych, ortonormalnych wektorów w N wymiarowej przestrzeni cząsteczek takich, że $c_n = (0, 0, \cdots, 1, 0, \cdots, 0)$, gdzie jedynka znajduje się na n-tym miejscu. Diada transponowana jest zdefiniowana następująco:

$$\mathbf{D}^T = \sum_{n=1}^{N} \vec{r}^{\,n} \vec{c}^{\,n}. \tag{60}$$

Za pomocą $N \times 3$ wymiarowej macierzy $\mathbf{D}$ zostały zdefiniowane rzeczywiste i symetryczne diady, które opisują ruch wewnętrzny, tj. macierz 3×3 tzw. diada kwadrupolowa $\mathbf{Q}$:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{D}^T \cdot \mathbf{D} = \sum_{n=1}^{N} \vec{r}^{\,n} \vec{r}^{\,n}, \tag{61}$$

oraz N wymiarowa diada $\mathbf{P}$:

$$\mathbf{P} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{D}^T = \sum_{nm} \vec{c}^{\,m} (\vec{r}^{\,m} \cdot \vec{r}^{\,n}) \vec{c}^{\,n}. \tag{62}$$

Macierze $\mathbf{Q}$ i $\mathbf{P}$ są dodatnio zdefiniowane, zatem można ja przekształcić do postaci diagonalnej o nieujemnych wartościach własnych.

Równanie własne dla $\mathbf{Q}$ ma postać:

$$\mathbf{Q} \cdot \vec{s}^{\,\alpha} = \lambda_\alpha \vec{s}^{\,\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, 3, \tag{63}$$

gdzie $\vec{s}^{\,\alpha}, \lambda_\alpha$ są odpowiednio ortonormalnymi wektorami własnymi oraz wartościami własnymi. Otrzymane wektory $\vec{s}^{\,\alpha}$ definiują układ wewnętrzny dla N cząstek. Podobnie mamy rozważając równanie własne dla $\mathbf{P}$:

$$\mathbf{P} \cdot \vec{v}^{\,q} = \Lambda_q \vec{v}^{\,q}, \tag{64}$$

gdzie Λ_q są wartościami własnymi, $\vec{v}^{\,q}$ ortonormalnymi N wymiarowymi wektorami własnymi.

W [34] przedstawiono twierdzenie, z którego wynika, że trzy wartości własne Λ_q odpowiadają $\lambda_\alpha, \alpha = 1, 2, 3$, a pozostałe $N - 3$ wartości własne Λ_q są równe zero. Dodatkowo wektory $\vec{v}^{\,\alpha}$, którym odpowiadają wartości własne λ_α mają postać:

$$\vec{v}^{\,\alpha} = \lambda_\alpha^{-\frac{1}{2}} \sum_{n=1}^{N} \vec{c}^{\,n}(\vec{r}^{\,n} \cdot \vec{s}^{\,\alpha}) = \lambda_\alpha^{-\frac{1}{2}} \sum_{n=1}^{N} \vec{c}^{\,n} \vec{r}^{\,n\alpha}, \tag{65}$$

tzn. n-ta współrzędna wektora $\vec{v}^{\,\alpha}$ jest rzutem n-tego wektora $\vec{r}^{\,n}$ na oś główną $\vec{s}^{\,\alpha}$ tensora kwadrupolowego $\mathbf{Q}$.

$N - 3$ wektorów własnych $\mathbf{P}$, którym odpowiada zerowa wartość własna, można wybrać na wiele sposobów zachowując ich ortonormalność względem siebie oraz do pozostałych trzech niezerowych wektorów własnych. Wektory odpowiadające zerowym wartościom własnym tworzą tzw. podprzestrzeń zerową, a pozostałe trzy podprzestrzeń wewnętrzną.

Kolejne twierdzenie przedstawione w [34] opisuje ruch układu wewnętrznego, którego początek znajduje się w punkcie środka masy. Zgodnie z nim wektory $\{\vec{v}^{\,\alpha}\}$ rotują w przestrzeni N wymiarowej tak, że zawsze są prostopadłe do kierunku określonego przez wektor należący do podrzestrzeni zerowej. Oznacza to, że parametry opisujące ruch trzech wektorów $\{\vec{v}^{\,\alpha}\}$ określają położenie nowego układu względem układu laboratoryjnego, oraz $3(N - 3)$ uogólnionych kątów Eulera, opisujących orientację $\vec{v}^{\,\alpha}$ w przestrzeni N wymiarowej, określają ruch cząstek w układzie wewnętrznym. Zatem nowymi współrzędnymi są: trzy współrzędne środka masy, trzy zmienne kolektywne $\mu_\alpha = \frac{1}{\sqrt{\lambda_\alpha}}$ opisujące rozmiar oraz kształt kwadrupolowej elipsoidy dla N cząstek oraz trzy kolektywne zmienne kątowe opisujące orientację osi głównych $\vec{s}^{\,\alpha}$ elipsoidy bezwładności i $3(N - 3)$ uogólnione kąty Eulera opisujące orientację $\vec{v}^{\,\alpha}$ w przestrzeni N wymiarowej. Zatem transformacja z układu laboratoryjnego do wewnętrznego może być zapisana następująco:

$$\vec{x}^{\,n} = \vec{R} + \sum_{\alpha} \vec{v}_n^{\,\alpha}(\xi_\sigma)\mu_\alpha \vec{s}^{\,\alpha}(\theta_\lambda), \tag{66}$$

gdzie $n = 1, \ldots, N, \;\; \alpha, \lambda = 1, 2, 3, \;\; \sigma = 1, \ldots, 3(N - 3)$ oraz $\xi_\sigma, \theta_\lambda$ parametryzują uogólnione kąty Eulera.

Niestety autorzy nic nie piszą o jednoznaczności przejścia do nowego układu. Z (66) nie widać, aby była ona zapewniona, ze względu na dowolne wybory kątów opisujących obrót osi układu oraz wektorów w przestrzeni zerowej. Jedyny warunek nałożony na te obroty dotyczy wektorów $\vec{v}^{\,\alpha}$, których obrót jest zawsze prostopadły do pewnego wektora z przestrzeni zerowej.

Powyższa metoda wprowadzenia nowych współrzędnych [34] jest podobna do przedstawionej w 1972 roku w [36], gdzie do opisu N cząstek użyte są trzy

$N-1$ wymiarowe wektory utworzone z wektorów Jacobiego zrzutowanych na osie główne bezwładności. Współrzędne kartezjańskie wektorów w $N-1$ wymiarowej przestrzeni opisane są za pomocą $3N-6$ kątów Eulera oraz trzech długości rozważanych wektorów.

Inna metoda opisu zmiennych wewnętrznych została przedstawione w [37]. W podanym artykule autorzy rozłożyli przestrzeń współrzędnych N cząstek, $\mathbb{R}^{3N}$, na orbity grupy Liego opisujące np. translacje, rotacje czy deformacje, oraz na tzw. gładkie krzywe transwersalne. W podanych artykule grupa Liego jest grupą kinematyczną działającą w przestrzeni Euklidesowej E tak, że każdy punkt z tej przestrzeni ma postać $gx_0 \in E$, gdzie $g \in G$ oraz $x_0 \in E$, czyli należy do pewnej orbity grupy G. Dodatkowo zakładając, że grupa $H \subset G$ jest stabilizatorem dla punktu x_0 dowolny punkt można zapisać $x = gH \cdot x_0$. Współrzędne na hiperprzestrzeni wyznaczonej działaniem grupy ilorazowej G/H nazwane zostały współrzędnymi kolektywnymi.

Gładka krzywa transwersalna jest zdefiniowana jako ciągły zbiór punktów przecinający każdą orbitę grupy G w jednym punkcie. Krzywa ta jest sparametryzowana przez współrzędne ξ, więc $x_0 \in E$ leżący na tej krzywej jest przedstawiony za pomocą tych zmiennych $x_0(\xi)$. Zatem dowolny $x \in E$ można otrzymać mając pewien element $gH \in G/H$ oraz ξ: $x = gH \cdot x_0(\xi)$. Ogólnie transformację współrzędnych wektora $x = (x^1, x^2, \cdots)$ można zapisać za pomocą reprezentacji $P(G/H)$ grupy G/H:

$$x^\nu = P(Hg^{-1})x_0^\nu(\xi), \ g \in G. \tag{67}$$

W przypadku, gdy $G \subset GL_+(3N, \mathbb{R})$ opis współrzędnych za pomocą macierzy reprezentacji $\mathcal{D}$ grupy $GL_+(3N, \mathbb{R})$ jest następujący:

$$x^{ni} = x_0^{mi}(\xi)\mathcal{D}_{mj\ ni}(Hg^{-1}). \tag{68}$$

Ruch rotacyjny dowolnego wektora x opisany jest w hiperpowierzchni $\mathbb{R}^{3N}$ określonej przez ustalony wektor opisujący środek masy $\vec{X} \in \mathbb{R}^3$ oraz rotujący wektor opisujący położenie N cząstek względem środka masy $x_0 \in \mathbb{R}^{3N-3}$. Oznacza to, że ta hiperpowierzchnia wyznaczona przez orbitę grupy $SO(3)$ oraz dowolną krzywą w $\mathbb{R}^{3N}$ leżącą na tej orbicie opisuje rotacje układu N cząstek.

Korzystają z (68) współrzędne w $\mathbb{R}^{3N}$ można przedstawić jako:

$$x^{ni} = X^i + x_0^{nA}(\xi)\mathcal{D}_{Ai}(r), \tag{69}$$

gdzie $r \in SO(3)$, $\mathcal{D}$ jest macierzą reprezentacji $SO(3)$, a ξ jest zbiorem wewnętrznych współrzędnych krzywej transwersalnej, oraz spełniony jest warunek:

$$\sum_{n=1}^{N} x_0^{nA}(\xi)x_0^{nB}(\xi) = \delta_{AB}\lambda_A^2. \tag{70}$$

W przypadku, gdy zmienimy grupę G na kinematyczną grupę $GL_+(3,\mathbb{R})$ można uzyskać opis wibracyjno-rotacyjny N cząstek. Oddzielając środek masy $X \in \mathbb{R}$ i z (68) dowolny punkt z $\mathbb{R}^{3N}$ można przedstawić jako sumę współrzędnych środka masy X oraz względnych współrzędnych kartezjańskich $\bar{x}_0$:

$$x^{ni} = X^i + \bar{x}_0^{n\alpha}(\xi)\mathcal{D}_{\alpha i}(g^{-1}),\ n = 1,\dots,N, \tag{71}$$

gdzie $\mathcal{D}$ jest macierzą reprezentacji grupy $GL_+(3,\mathbb{R})$. Korzystając z odpowiedniego zapisu $g \in GL_+(3,\mathbb{R})$ uzyskuje się rozkład współrzędnych na część wibracyjną i rotacyjną. Autorzy założyli, że $g = \mathcal{R}_1^{-1} S \mathcal{R}_2$, gdzie $\mathcal{R}_1,\ \mathcal{R}_2 \in SO(3)$ oraz S jest rzeczywistą diagonalną macierzą 3×3, która jest dodatnio określona. Przy ustalonej kolejności pomiędzy diagonalnymi elementami S^{-1} oznaczonymi $\lambda_A,\ A = 1,2,3$, podany rozkład staje się jednoznaczny. Transformacja z układu laboratoryjnego do kolektywnych współrzędnych opisujących $\mathcal{R}_1,\ \mathcal{R}_2$ oraz λ_A ma postać:

$$x^{ni} = X^i + \sum_{A,\alpha} \mathcal{D}_{Ai}(\mathcal{R}_1)\lambda_A \mathcal{D}_{A\alpha}(\mathcal{R}_2)\bar{x}_0^{n\alpha}(\xi). \tag{72}$$

Łącznie współrzędnych kolektywnych jest dziewięć: trzy kąty Eulera dla $\mathcal{R}_1 \in SO(3)$ oraz $\mathcal{R}_2 \in SO(3)$ opisujące rotacje, a także trzy $\lambda_A,\ A = 1,2,3$ odpowiadające za wibracje. Wybór współrzędnych wewnętrznych opisujących gładką krzywą transwersalną nie jest jednoznaczny. Można je wybrać tak, aby spełniały równanie:

$$\sum_{n=1}^{N} \bar{x}_0^{n\alpha}(\xi)\bar{x}_0^{n\beta}(\xi) = \delta_{\alpha\beta}. \tag{73}$$

Taki wybór oznacza, że r_1 jest obrotem diagonalizującym tensor kwadrupolowy

$$\mathcal{D}_{Ai}(\mathcal{R}_1)(\sum_{n=1}^{N} \bar{x}_0^{ni}\bar{x}_0^{nj})\mathcal{D}_{Bj}(\mathcal{R}_1) = \delta_{AB}\lambda_A^2. \tag{74}$$

Dla powyższych rozważań grupa H jest jednostkowa.

Dodatkowo autorzy [37] analogicznie jak w [36] wykorzystali podwójną możliwość opisu $\mathbb{R}^{3N}$, tj. przedstawienie jej jako N wektorów o wymiarze 3 albo trzech wektorów N wymiarowych. Założyli, że hiperpowierzchnia w $\mathbb{R}^{3N}$ otrzymywana jest dla wybranego wektora $x_0 \in \mathbb{R}^{3N}$ za pomocą rotacji $SO(N)$ w przestrzeni N wymiarowej, transformacji skalowania $\mathbb{R}^3_+$ długości trzech wektorów N wymiarowych oraz rotacji w przestrzeni fizycznej $SO(3)$. Zatem mamy zbiór punktów $x \in \mathbb{R}^{3N}$, które mają postać:

$$x = \mathcal{R}'^{-1} S \mathcal{R}^{-1},\ \mathcal{R}' \in SO(N), S \in \mathbb{R}^3_+, \mathcal{R} \in SO(3), \tag{75}$$
$$\mathcal{R}'^{-1} S \mathcal{R}^{-1} \in GL_+(3N,\mathbb{R}).$$

Otrzymana hiperpowierzchnia (75) pokrywa orbity $GL_+(3N,\mathbb{R})$, a zatem prawie całą $\mathbb{R}^{3N}$.

W podanej hiperprzestrzeni współrzędne cząstek mogą być zapisane jako:

$$x^{ni} = \sum_{km} \mathcal{D}_{ki}^{SO(3)}(\mathcal{R}')\lambda_k \mathcal{D}_{mn}^{SO(N)}(\mathcal{R}) x_0^{mk}, \tag{76}$$

gdzie $\mathcal{D}^{SO(3)}$ i $\mathcal{D}^{SO(N)}$ są macierzami reprezentacji grup $SO(3)$ i $SO(N)$, a $\lambda_k,\ k = 1,2,3$ są dodatnimi liczbami rzeczywistymi.

Podobny opis ruchu w układzie wewnętrznym przedstawionym w [37] można znaleźć w [38].

Kolejny przykład wyboru zmiennych wewnętrznych jest przedstawiony w [39], gdzie rozważany jest układ trzech atomów, którego ruch opisany jest w przestrzeni mającej punkty osobliwości. Do opisu położeń atomów wykorzystywane są wektory Jacobiego utworzone w układzie laboratoryjnym $\vec{r}^{\,i},\ i = 1,2$. Następnie autorzy wprowadzają przestrzeń konfiguracyjną $\mathbb{R}^6$, w której punktem Q są współrzędne dwóch rozważanych wektorów Jacobiego, tzn. odpowiada jemu para wektorów $(\vec{r}^{\,1}, \vec{r}^{\,2})$. W przestrzeni tej pomijane są współrzędne środka masy, które w dalszej części opisu nie są potrzebne. Działając rotacją $\mathcal{R} \in SO(3)$ na $\vec{r}^{\,1},\ \vec{r}^{\,2}$:

$$\vec{r}^{\,\prime\alpha} = \mathcal{R}\vec{r}^{\,\alpha},\ \alpha = 1,2, \tag{77}$$

$$\mathcal{R} \in SO(3) \tag{78}$$

otrzymuje się podział przestrzeni konfiguracyjnej na orbity dla punktu Q. Wszystkie punkty należące do tej samej orbity opisują tę samą konfigurację atomów. Różnią się jedynie orientacją w przestrzeni opisaną przez trzy kąty Eulera. Autorzy rozważają tylko te konfiguracje, które nie są liniowe oraz nie opisują zderzeń trzech atomów. Orbity grupy rotacyjnej tworzą tak zwane włókna rotacyjne.

Poza obrotami opisanymi grupą $SO(3)$ dodatkowo wprowadzona jest rotacja kinematyczna określona przez grupę $SO(2)$:

$$\vec{r}^{\,\prime\alpha} = \sum_{\beta=1}^{2} \mathcal{K}_{\alpha\beta}(\phi)\vec{r}^{\,\beta},\ \mathcal{K} \in SO(2), \tag{79}$$

$$\mathcal{K} = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix},\ 0 \leq \phi \leq 2\pi. \tag{80}$$

Działając grupą kinematyczną na określoną konfigurację otrzymuje się inną, która opisana jest przez punkt leżący na innym włóknie rotacyjnym. Autorzy [39] używając metody jak w [34] pokazali, że w obrębie włókna rotacyjnego

nie zmienia się wzajemne położenie trzech ciał, oraz dla włókna kinematycznego nie zmienia się postać tensora momentu bezwładności. Orbita grupy kinematycznej dla punktu Q jest jednowymiarową krzywą w przestrzeni konfiguracyjnej, która leży na jej powierzchni, ponieważ grupa kinematyczna nie zmienia tensora bezwładności zatem nie rusza też kierunków osi głównych. Co najwyżej może je przestawiać pomiędzy sobą.

Przy założeniu, że trzy ciała leżą na jednej płaszczyźnie pojawia się osiem możliwości wyboru osi układu wewnętrznego, który jest zdefiniowany jako osie główne. Zatem w przestrzeni konfiguracyjnej wprowadzono funkcję ośmiowartościową, której gałęzie odpowiadają poszczególnym wyborom orientacji układu wewnętrznego. Funkcja ta przecina wiązkę rotacji w ośmiu punktach. Każda z wartości tej funkcji jest gładką trójwymiarową przestrzenią w przestrzeni konfiguracyjnej. Zatem wybór układu wewnętrznego związany jest z wyborem punktu na wiązce opisującej interesujący nas kształt. Przejście między różnymi układami można uzyskać za pomocą ośmioelementowej grupy odpowiedzialnej za zmianę orientacji osi układu. Wybór układu wewnętrznego dla pewnego obszaru w przestrzeni konfiguracyjnej jest związany z wyborem powierzchni przecinającej włókna rotacyjne dokładnie w jednym punkcie.

W przestrzeni kształtów $\mathbb{R}^6$ autorzy wprowadzili współrzędne związane z wektorami Jacobiego $\{\vec{r}_\alpha\}$:

$$\begin{aligned} w_1 &= |\vec{r}^{\,1}|^2 - |\vec{r}^{\,2}|^2 = \rho^2 \cos(2\Theta)\cos(2\Phi), \\ w_2 &= 2\vec{r}^{\,1} \cdot \vec{r}^{\,2} = \rho^2 \cos(2\Theta)\sin(2\Phi), \\ w_3 &= 2|\vec{r}^{\,1} \times \vec{r}^{\,2}| = \rho^2 \sin(2\Theta), \end{aligned} \tag{81}$$

gdzie $-\infty < w_1, w_2 < \infty$ oraz $0 \leq w_3$, (ρ, Θ, Φ) są współrzędnymi hipersferycznymi [29]. Ponieważ rozważany jest tylko ruch niewspółliniowy, wówczas w przestrzeni kształtów nie ma osi w_3 oraz płaszczyzny $w_1 w_2$. W takiej przestrzeni moment bezwładności nie jest zdegenerowany oraz określone są kierunki osi głównych. Podany wybór współrzędnych (w_1, w_2, w_3) oznacza, że współrzędna w_3 jest niezmiennicza pod działaniem grupy kinematycznej, a działanie na pozostałe współrzędne opisane jest za pomocą obrotu o kąt 2ϕ wokół osi w_3:

$$\begin{pmatrix} w_1' \\ w_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos 2\phi & -\sin 2\phi \\ \sin 2\phi & \cos 2\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix}, \quad w_3' = w_3. \tag{82}$$

Kąt 2ϕ odpowiada hipersferycznemu kątowi 2Φ.

Dla grupy kinematycznej działającej na przestrzeni konfiguracyjnej widać, że jeśli $\phi \neq 2\pi$, to nie otrzymuje się początkowego punktu Q leżącego na włóknie rotacyjnym. Nie oznacza to, że dla $\phi \neq 2\pi$ nie powraca się do

tego samego włókna. Taki przypadek istnieje dla $\psi = \pi$, a obrót kinematyczny $\mathcal{K}(\pi)$ działa jak inwersja i przeprowadza wektory Jacobiego $\{\vec{r}^{\alpha}\}$ w $\{-\vec{r}^{\alpha}\}$. Opisane działanie można również uzyskać za pomocą zewnętrznych rotacji. Jest to obrót o π wokół osi OZ. Można to zapisać następująco $\mathcal{K}(\pi)Q = \mathcal{R}_z(\pi)Q$. Korzystając z tego autorzy rozważyli dowolną krzywą na przestrzeni kształtów biegnącą wokół osi w_3. Taką pętlę można przedstawić za pomocą orbity kinematycznej na przestrzeni kształtów. Okazuje się, że dla rozważanego przypadku trzech ciał nie ma możliwości powrotu do początkowego układu wewnętrznego. W przypadku, gdy kinematyczna orbita powróci do punktu początkowego w przestrzeni kształtów, to w przestrzeni konfiguracyjnej również powróci do tej samej orbity rotacyjnej, ale z dokładnością do orientacji. Dopiero podwójny obrót $\mathcal{R}_z(\pi)^2$ w przestrzeni kształtów pozwoli powrócić do tego samego układu wewnętrznego. Pętle, które nie obiegają punktów osobliwych w przestrzeni kształtów powracają do początkowego układu wewnętrznego w przestrzeni konfiguracyjnej.

W [39] dokładnie przedstawiono również przejście do układu Eckarta, które pozwoliło, między innymi, na pozbycie się punktów osobliwych na osi w_3.

Przypadek dla czterech atomów został opisany w [40] i [41].

Rozszerzenie podanej metody dla N atomów zostało dokładniej przedstawiona w [41] oraz [42].

Poza podanymi autorami opis ruchu w układzie wewnętrznym wykorzystującym włókna można znaleźć między innymi w [43].

Dla jądra atomowego autorzy [44, 45] współrzędne wewnętrzne przedstawili za pomocą współrzędnych opisujących układ N nukleonów. Do ich opisu użyli wektorów Jacobiego, które po przejściu do środka masy mają postać:

$$x_i^s = \sqrt{s(s+1)}[\sum_{t=1}^{s} X_i^{\prime t} - sX_i^{\prime s+1}],\ s = 1, \cdots, N-1, \tag{83}$$

gdzie $X_i^{\prime s},\ i = 1, 2, 3,\ s = 1, \cdots, N$ są współrzędnymi nukleonów w układzie laboratoryjnym.

Wyrazy macierzy Q opisującej kwadrupol względem środka masy:

$$Q_{ij} = \sum_{s=1}^{N-1} X_i^s X_j^s,\ i, j = 1, 2, 3. \tag{84}$$

Kawadrupol w układzie wewnętrznym opisany jest przez trzy rzeczywiste i dodatnie pierwiastki λ równania charakterystycznego dla (84):

$$\det[\lambda\delta_{ij} - Q_{ij}] = 0. \tag{85}$$

Za pomocą pierwiastków równania (85) $\lambda = \rho_k^2$ autorzy znaleźli trzy nowe zmienne ρ, b, c spełniajace relacje:

$$\rho_k^2 = \frac{\rho^2}{3}[1 + 2b\cos(c - 2\pi k/3)]. \quad (86)$$

Zmienne te zależą od kwadrupola w układzie laboratoryjnym Q oraz wewnętrznego Q^{wew}, którego wyrazy mają postać $Q_{ij}^{wew} = Q_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\mathrm{Tr}(Q)$:

$$\rho^2 = \mathrm{Tr}(Q), \quad (87)$$

$$b^2 = \tfrac{3}{2}\mathrm{Tr}((Q^{wew})^2)/(\mathrm{Tr}(Q))^2, \quad (88)$$

$$\cos(3c) = \sqrt{54}\det(Q^{wew})/\sqrt[3]{\mathrm{Tr}((Q^{wew})^2)}. \quad (89)$$

Trzy zmienne ρ, b, c oraz trzy katy Eulera $\theta_k,\ k = 1, 2, 3$ są zmiennymi kolektywnymi.

Do pełnego opisu ruchu nukleonów w układzie wewnętrznym brakuje jeszcze $3N-9$ zmiennym, które można otrzymać z parametrów opisujących grupę $O(N-1)$. Ponieważ współrzędne w układzie laboratoryjnym można zapisać za pomocą sześciu kolektywnych współrzędnych oraz grupy $O(N-1)$ mamy:

$$X_{is} = \sum_{k=1}^{3}\{\rho_k D^1_{ki}(\theta_j) D^1_{N-4+k,s}(\phi)\}, \quad (90)$$

gdzie $D^1(\theta_j)$ jest macierzą reprezentacji $O(3)$, $D^1(\phi)$ dla grupy $O(N-1)$ oraz

$$q = \left(D^1(\theta_k)\right)^T \begin{pmatrix} \rho_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_3^2 \end{pmatrix} D^1(\theta_k). \quad (91)$$

W (90) występują tylko trzy ostatnie wiersze zatem jest tylko $3N-9$ zmiennych ją opisujących. Kąty θ_k występujące w (90) są kątami Eulera, które określają położenie układu wewnętrznego.

Transformacja (90) musi być jednoznaczna co zapewniają nierówności $0 \leq \rho_2 \leq \rho_1 \leq \rho_3 \leq \infty$. Oznacza to, że również b i c są ograniczone, np. $0 \leq c \leq \frac{\pi}{3}$ oraz b nie może być większe od jedynki.

Zachowanie się jądra atomowego można rozważać również względem zmian współrzędnych opisujących jego kształt, [46, 47, 48]. Powierzchnię jądra atomowego przedstawia się za pomocą zespolonych współrzędnych kolektywnych $\alpha_{\lambda\mu}$:

$$R(\theta, \phi, t) = R_0[1 + \sum_{\lambda,\mu}\alpha^*_{\lambda\mu}(t)Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)], \quad (92)$$

gdzie R_0 określa promień sfery, $\alpha_{\lambda\mu}(t)$ są zależne od czasu i opisują kształt jądra. Dodatkowo $\alpha_{\lambda\mu}$ są członami tensora sferycznego $\alpha^{[\lambda]} = \{\alpha_{\lambda\mu}\}$, $\mu = -\lambda, \ldots, \lambda$, który jest funkcją $3N$ współrzędnych N nukleonów wchodzących w skład jądra. Ogólnie zależność ta nie jest znana, a ruch jądra atomowego rozpatruje się w zmiennych $\alpha_{\lambda\mu}$. Dowolny obrót jądra opisany przez grupę $SO(3)$ przedstawia się jako transformację:

$$\alpha'_{\lambda\mu} = \sum_{\nu} D^{\lambda}_{\nu\mu}(\omega_1, \omega_2, \omega_3)\alpha_{\lambda\nu}, \tag{93}$$

gdzie $(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ są kątami Eulera, a $D^{\lambda}_{\nu\mu}$ są funkcjami Wignera, [49]. Ze względu na to, że powierzchnia jądrowa opisana jest przez zmienne rzeczywiste otrzymuje się związek:

$$\alpha^*_{\lambda\mu} = (-1)^{\mu}\alpha_{\lambda-\mu}. \tag{94}$$

Dla $\lambda = 2$ powierzchnia jądra, dla małych $\alpha_{2\nu}$, w układzie laboratoryjnym jest elipsoidą:

$$R(\theta, \phi, t) = R_0[1 + \sum_{\mu} \alpha^*_{2\mu} Y_{2\mu}(\theta, \phi)]. \tag{95}$$

Układ wewnętrzny dla takiego opisu związany jest z wyborem warunków nałożonych na $\alpha_{2\nu}$, tak aby liczba wewnętrznych współrzędnych kolektywnych była równa liczbie współrzędnych w układzie laboratoryjnym. Nakładając warunki $\alpha_{22} = \alpha_{2-2}, \alpha_{2\pm1} = 0$ otrzymuje się układ, w którym tensor kwadrupolowy ma postać diagonalną. Zmiennymi wewnętrznymi są trzy kąty Eulera $(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ opisujące położenie układu wewnętrznego względem laboratoryjnego oraz α_{22}, α_{20}, które mają wartości rzeczywiste. Przedstawione zmienne wewnętrzne można zapisać również za pomocą innych współrzędnych β i γ wprowadzonych przez Bohra, [50, 51]:

$$\alpha_{22} = \beta \cos\gamma, \quad \alpha_{20} = \frac{\beta}{\sqrt{2}} \sin\gamma. \tag{96}$$

Ogólnie przejście z układu laboratoryjnego do wewnętrznego można zapisać następująco:

$$\alpha^{lab}_{\lambda\mu} = \sum_{\nu=-\lambda}^{\lambda} D^{\lambda *}_{\mu\nu}(\Omega)\, \alpha_{\lambda\nu}, \tag{97}$$

gdzie na $\alpha_{\lambda\nu}$ są nałożone trzy warunki. Według autorów [46, 47] istnieją 24 możliwości zapisu jednego punktu z układu laboratoryjnego w układzie wewnętrznym. Jest to związane z tym, że można na 24 sposoby wybrać oznaczenia osi nowego układu. Obroty, z których otrzymuje się wszystkie 24 możliwości można zapisać za pomocą trzech generatorów, które działają na osie

nowego układu $X,\ Y,\ Z$ oraz na kąty Eulera Ω następująco:

$$\mathcal{R}_1(X,Y,Z,\omega_1,\omega_2,\omega_3) = (X,-Y,-Z,\omega_1+\pi,\pi-\omega_2,-\omega_3), \tag{98}$$
$$\mathcal{R}_2(X,Y,Z,\omega_1,\omega_2,\omega_3) = (y,-X,Z,\omega_1,\omega_2,\omega_3+\tfrac{\pi}{2}), \tag{99}$$
$$\mathcal{R}_3(X,Y,Z,\omega_1,\omega_2,\omega_3) = (Y,Z,X,\omega_1,\omega_2+\tfrac{\pi}{2},\omega_3+\tfrac{\pi}{2}). \tag{100}$$

Okazuje się, że transformacja pomiędzy układami

$$\alpha^{lab}_{2\mu} = D^{2*}_{\mu 0}(\omega_1,\omega_2,\omega_3)\alpha_{20} + \left[D^{2*}_{\mu -2}(\omega_1,\omega_2,\omega_3) + D^{2*}_{\mu 2}(\omega_1,\omega_2,\omega_3)\right]\alpha_{22}, \tag{101}$$

pod dzialaniem powyższych obrotów jest niezmiennicza, gdzie działanie $\mathcal{R}_i,\ i = 1,2,3$ na $\alpha_{22},\ \alpha_{20}$ ma postać:

$$\mathcal{R}_1\alpha_{22} = \alpha_{22},\ \mathcal{R}_2\alpha_{22} = -\alpha_{22},\ \mathcal{R}_3\alpha_{22} = -\tfrac{\sqrt{6}}{4}\alpha_{20} - \tfrac{1}{2}\alpha_{22}, \tag{102}$$
$$\mathcal{R}_1\alpha_{20} = \alpha_{20},\ \mathcal{R}_2\alpha_{20} = \alpha_{20},\ \mathcal{R}_3\alpha_{22} = \tfrac{\sqrt{6}}{4}\alpha_{22} - \tfrac{1}{2}\alpha_{20}. \tag{103}$$

Obroty utworzone za pomocą $\mathcal{R}_1,\mathcal{R}_2,\mathcal{R}_3$ tworzą grupę O. Odpowiednio dla zmiennych β i γ mamy:

$$\mathcal{R}_1(\beta,\gamma,\omega_1,\omega_2,\omega_3) = (\beta,\gamma,\omega_1+\pi,\pi-\omega_2,-\omega_3), \tag{104}$$
$$\mathcal{R}_2(\beta,\gamma,\omega_1,\omega_2,\omega_3) = (\beta,-\gamma,\omega_1,\omega_2,\omega_3+\tfrac{\pi}{2}), \tag{105}$$
$$\mathcal{R}_3(\beta,\gamma,\omega_1,\omega_2,\omega_3) = (\beta,\gamma-\tfrac{2}{3}\pi,\omega_1,\omega_2+\tfrac{\pi}{2},\omega_3+\tfrac{\pi}{2}). \tag{106}$$

W przypadku, gdy nie rozważa się zależności od kątów Eulera, wówczas dla $\alpha_{22},\ \alpha_{20}$ otrzymuje się jedynie sześć przekształceń zmieniających ich postać. Można je przedstawić za pomocą transformacji $T_1,\ T_2$:

$$T_1(\alpha_{20},\ \alpha_{22}) = (\alpha_{20},\ \alpha_{22}), \tag{107}$$
$$T_2(\alpha_{20},\ \alpha_{22}) = (-\tfrac{1}{2}\alpha_{20} + \tfrac{\sqrt{6}}{4}\alpha_{22}, -\tfrac{\sqrt{6}}{4}\alpha_{20} - \tfrac{1}{2}\alpha_{22}). \tag{108}$$

Wszystkie te przekształcenia $(\alpha_{20},\ \alpha_{22})$ mają postać:

$$T_2(\alpha_{20},\ \alpha_{22}) = (-\tfrac{1}{2}\alpha_{20} + \tfrac{\sqrt{6}}{4}\alpha_{22}, -\tfrac{\sqrt{6}}{4}\alpha_{20} - \tfrac{1}{2}\alpha_{22}), \tag{109}$$
$$T_2^2(\alpha_{20},\ \alpha_{22}) = (-\tfrac{1}{2}\alpha_{20} - \tfrac{\sqrt{6}}{4}\alpha_{22}, \tfrac{\sqrt{6}}{4}\alpha_{20} - \tfrac{1}{2}\alpha_{22}), \tag{110}$$
$$T_2^3(\alpha_{20},\ \alpha_{22}) = (\alpha_{20},\ \alpha_{22}), \tag{111}$$
$$T_1T_2(\alpha_{20},\ \alpha_{22}) = (-\tfrac{1}{2}\alpha_{20} + \tfrac{\sqrt{6}}{4}\alpha_{22}, \tfrac{\sqrt{6}}{4}\alpha_{20} + \tfrac{1}{2}\alpha_{22}), \tag{112}$$
$$T_1T_2^2(\alpha_{20},\ \alpha_{22}) = (-\tfrac{1}{2}\alpha_{20} - \tfrac{\sqrt{6}}{4}\alpha_{22}, -\tfrac{\sqrt{6}}{4}\alpha_{20} + \tfrac{1}{2}\alpha_{22}), \tag{113}$$
$$T_1(\alpha_{20},\ \alpha_{22}) = (\alpha_{20}, -\alpha_{22}). \tag{114}$$

Pozwala to płaszczyznę $\alpha_{20}\alpha_{22}$ podzielić na sześć części równoważnych względem działania grupy O. Ponieważ w zmiennych $\alpha_{20},\ \alpha_{22}$ opis jednej z części

jest dość skomplikowany, dlatego przechodzi się do zmiennych β, γ. Otrzymuje się w ten sposób ograniczenie dla pierwszej części $0 \leq \gamma \leq \frac{\pi}{3}$. Ze względu na to, że dowolnej $\alpha_{2\mu}^{lab}$ z układu laboratoryjnego odpowiada jedna z wartości z każdej z sześciu części, dlatego ogranicza się rozważania tylko do jednej części.

W [48] z równań:

$$\sum_\mu D_{\mu\pm1}^{2*}(\omega_1, \omega_2, \omega_3)\alpha_{2\mu} = 0, \tag{115}$$

$$\sum_\mu D_{\mu2}^{2*}(\omega_1, \omega_2, \omega_3)\alpha_{2\mu} = \sum_\mu D_{\mu-2}^{2*}(\omega_1, \omega_2, \omega_3)\alpha_{2\mu} \tag{116}$$

otrzymano 24 niezmiennicze transformacje, ale ze względu na to, że również powyższe równości zachodzą dla inwersji, więc wszystkich przekształceń nie zmieniających (α_{20}, α_{22}) względem układu laboratoryjnego jest 48, co daje większą grupę O_h. Tak jak dla O również płaszczyznę $\alpha_{20}\alpha_{22}$ można podzielić na sześć części i wprowadza się identyczne ograniczenia na γ.

W dalszej części pracy przedstawione będą uzyskane wyniki rozważań opierających się na ostatnim przedstawionym układzie wewnętrznym. Próba jednoznacznego opisu jądra atomowego we współrzędnych wewnętrznych wymusiła wprowadzenie nowego pojęcia grupy symetryzacji, której postać zależy od sposobu opisu układu wewnętrznego.

3 Grupy symetryzacji dla wybranych układów wewnętrznych w modelu kolektywnym

W przedstawionej pracy wszystkie rozważania opierają się na pewnych własnościach układu wewnętrznego modeli kolektywnych. Własności te związane są z brakiem jednoznaczności transformacji pomiędzy układem laboratoryjnym i wewnętrznym. Pojawiająca się niejednoznaczność związana jest z koniecznością zachowania interpretacji fizycznej części obserwabli.

W dalszej części, dla ułatwienia, zmienne laboratoryjne, w odróżnieniu od wewnętrznych są oznaczone symbolem ^{lab}.

W układzie laboratoryjnym z opisem powierzchni jądra atomowego $R^{lab}(\theta^{lab}, \phi^{lab})$ związane są laboratoryjne zmienne kolektywne $\alpha_{\lambda\mu}^{lab}$, [47, 52, 53, 54, 55]:

$$R^{lab}(\theta^{lab}, \phi^{lab}) = R_0 \left[1 + \sum_{\lambda\mu} \alpha_{\lambda\mu}^{lab\,*} Y_{\lambda\mu}(\theta^{lab}, \phi^{lab})\right]. \tag{117}$$

W zależności od wartosci λ, opisują one różne rodzaje ruchów powierzchni jądrowej, np. dla:

(i) $\lambda = 0$ opisują wibracje związane ze zmianą objętości jądra,

(ii) $\lambda = 1$ opisują drgania dipolowe,

(iii) $\lambda = 2$ są określane jako drgania kwadrupolowe,

(iv) $\lambda = 3$ odpowiadają drganiom oktupolowym.

Ze względu na możliwość uproszczenia obliczeń oraz bardziej bezpośrednią interpretację fizyczną, interesuje nas transformacja do nowego układu związanego bezpośrednio z jądrem atomowym. Nowy układ określony jest przez trzy kąty Eulera $\Omega = (\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)$, które opisują jego chwilowe położenie względem układu laboratoryjnego oraz przez trzy dodatkowe warunki określające układ wewnętrzny $f_k(\alpha_{\lambda\mu}, \Omega) = 0, \quad k = 1, 2, 3$. Są one nałożone na zmienne kolektywne wewnętrzne, tj. na zmienne opisujące kształt powierzchni jądrowej $\alpha_{\lambda\mu}$ oraz na kąty Eulera Ω. W naszym przypadku będą rozważane jedynie warunki, które dotyczą zmiennych określających ruch wibracyjny.

Pojawienie się trzech warunków nałożonych na zmienne wewnętrzne, związane jest z zachowaniem wymiaru przestrzeni opisującej ruch w układzie laboratoryjnym oraz wewnętrznym. Wprowadzenie trzech kątów Eulera powoduje zwiększenie o trzy liczby zmiennych wewnętrznych, gdy ich liczba w układzie laboratoryjnym nie ulega zmianie.

Dodatkowo do opisu transformacji do układu wewnętrznego potrzebne są związki pomiędzy laboratoryjnymi zmiennymi kolektywnymi i zmiennymi opisującymi powierzchnię w nowym układzie [47, 52, 53, 54]. Zatem pełna postać transformacji pomiędzy układem laboratoryjnym i wewnętrznym jest następująca:

$$\begin{cases} \alpha^{lab}_{\lambda\mu} = \sum_{\nu=-\lambda}^{\lambda} D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)^* \, \alpha_{\lambda\nu}, \\ f_k(\alpha_{\lambda\mu}, \Omega) = 0, \quad k = 1, 2, 3, \end{cases} \tag{118}$$

gdzie $\alpha^{lab}_{\lambda\mu}$ są zmiennymi w układzie laboratoryjnym, $\alpha_{\lambda u}$ - w układzie wewnętrznym, $D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)^*$ są funkcjami Wignera grupy $SO(3)$ sparametryzowanymi kątami Eulera Ω [49].

Powierzchnia jądrowa w układzie wewnętrznym ma postać analogiczną jak w zmiennych laboratoryjnych (117). Zmiennymi opisującymi ruch powierzchni jądowej są zmienne $\alpha_{\lambda\mu}$ zdefiniowane przez (118). Natomiast kąty sferyczne θ, ϕ w funkcjach sferycznych $Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)$ są określone względem układu wewnętrznego.

Przy transformacji do układu wewnętrznego trzeba pamiętać, że na ogół nie jest ona jednoznacznie określona. To oznacza, że jednej wartości zmiennej kolektywnej w układzie laboratoryjnym $\alpha^{lab}_{\lambda\nu}$ może odpowiadać wiele wartości zmiennych wewnętrznych. Niejednoznaczność przekształcenia układu

laboratoryjnego do wewnętrznego dla dwóch różnych wartości zmiennych wewnętrznych $(\alpha_{\lambda\nu}, \Omega) \neq (\alpha^{'}_{\lambda\nu}, \Omega^{'})$ odpowiadającym tej samej wartości w układzie laboratoryjnej, można zapisać następująco:

$$\alpha^{lab}_{\lambda\nu} = \alpha^{lab}_{\lambda\nu}(\alpha_{\lambda\nu}, \Omega) = \alpha^{lab}_{\lambda\nu}(\alpha'_{\lambda\nu}, \Omega'). \tag{119}$$

Okazuje się, że w układzie wewnętrznym wiele równoważnych stanów kwantowych posiada ten sam odpowiednik w układzie laboratoryjnym. Ponieważ interesują nas jedynie stany fizyczne, zatem wymagana jest również ich jednoznaczność przy transformacjach pomiędzy układami.

Do konstrukcji stanów fizycznych należy znaleźć tranformacje $\overline{g}$ w układzie wewnętrznym, które nie zmieniają zmiennych laboratoryjnych, to znaczy zachowują równość:

$$\alpha^{lab}_{\lambda\nu}(\overline{g}(\alpha_{\lambda\nu}, \Omega)) = \alpha^{lab}_{\lambda\nu}(\alpha_{\lambda\nu}, \Omega). \tag{120}$$

Ponieważ przekształcenie pomiędzy układem laboratoryjnym i wewnętrznym nakłada dodatkowe warunki na zmienne wewnętrzne określone przez równości $f_k(\alpha_{\lambda\mu}, \Omega) = 0$ z (118), zatem również (120) nie może wyprowadzać $\alpha_{\lambda\nu}$, Ω poza wybraną przestrzeń. Oznacza to, że szukając transformacji $\overline{g}$ ze wzoru (120) jednocześnie otrzymujemy przekształcenia opisane przez układ równań (118). W dalszych rozważaniach potrzebna nam będzie następująca definicja:

Definicja 1. *Zbiór wszystkich operacji $\overline{g}$ ze wzoru (120), zachowujących warunki określone przez wszystkie równania $f_k(\alpha_{\lambda\mu}, \Omega) = 0$ z (118) tworzy grupę nazywaną w dalszej części pracy grupą symetryzacji $\overline{G}_s$.*

Z warunku (120) otrzymujemy, że $\overline{G}_s$ składa się z takich obrotów działających na zmienne wewnętrzne, które zapewniają niezmienniczość laboratoryjnej postaci powierzchni jądrowej. Grupę tę możemy również wykorzystać do wyboru stanów fizycznych, które są niezmiennicze pod jej działaniem, a co zapewnia jednoznaczność transformacji ich z układu laboratoryjnego do wewnętrznego.

Każdej grupie symetryzacji można przypisać odpowiednią grupę działającą w układzie laboratoryjnym, co wynika z ogólniejszego opisu przedstawionego dla dowolnej grupy, gdzie wykorzystywane jest pojęcie grupy wewnętrznej [7, 8]. Wewnętrzna grupa rotacji $\overline{SO(3)}$ pojawia się już u A. Bohra i B. Mottelsona w [56]. Autorzy otrzymali ją z transformacji operatorów z układu laboratoryjnego do wewnętrznego używając jako zmiennych dynamicznych kątów Eulera opisujących położenie nowego układu względem laboratoryjnego. Otrzymali w ten sposób moment pędu w układzie rotującym $J^{'}_{\mu}$, $\mu = 0, \pm 1$, który nie zależy od orientacji układu laboratoryjnego, więc

komutuje on ze składowymi momentu pędu J_ν, $\nu = 0, \pm 1$, w zewnętrznym układzie współrzędnych. Dodatkowo operatory $J^{'}_{\mu}$ są traktowane jako generatory obrotów układu wewnętrznego wokół jego osi o kąt przeciwny do kąta jaki by odpowiadał obrotowi układu laboratoryjnego. Oznacza to, że komutatory dla momentu pędu w układzie wewnętrznym mają przeciwny znak niż dla układu laboratoryjnego, [56, 52, 49].

Dopiero podczas rozbudowy pojęcia grupy wewnętrznej [7, 8], pokazano, że grupie obrotów jądra w układzie laboratoryjnym $SO(3)$, odpowiada grupa wewnętrzna $\overline{SO(3)}$, której generatorami są momenty pędu w układzie wewnętrznym. Pojęcie grupy wewnętrznej zostało również rozszerzone na dowolną grupę, co pozwoliło zastosować teorię grup między innymi do opisu kolektywnego ruchu jądra atomowego w układzie rotującym.

Zgodnie z [7, 8] chcąc zdefiniować grupę wewnętrzną $\overline{G}$ odpowiadającą grupie laboratoryjnej G o wymiarze $\dim(G)$ trzeba zdefiniować formalne dodawanie elementów tej grupy oraz mnożenie przez liczbę zespoloną. Wówczas otrzymuje się przestrzeń liniową utworzoną przez grupę G, tzw. przestrzeń grupową L_G. Dowolny wektor P z tej przestrzeni można zapisać jako kombinację liniową elementów grupy G:

$$P = \sum_{a=1}^{\dim(G)} u_a(g_a) g_a, \qquad g_a \in G,\ a = 1, 2, \ldots, \dim(G),\ u_a \in \mathbb{C}. \tag{121}$$

Dla każdego elementu $g_a \in G$ określamy również operator $\overline{g}_a$ działający na L_G następująco:

$$\overline{g}_a s = s g_a,\ \forall s \in L_G. \tag{122}$$

Z równania (122) mamy, że operator $\overline{g}_a$ działając na dowolny wektor z przestrzeni grupowej L_G daje nowy wektor w postaci sg_a. Zgodnie z definicją przyjętą przez autorów zbiór wszystkich operatorów $\overline{g}_a$ tworzy grupę wewnętrzną $\overline{G}$.

Grupa wewnętrzna ma dwie ważne własności, [7, 8]:

1. Grupy G oraz $\overline{G}$ są antyizomorficzne.
   Oznacza to, że iloczynowi dwóch elementów $g_1 g_2$ z G odpowiada iloczyn $\bar{g}_2 \bar{g}_1$ z grupy wewnętrznej $\overline{G}$.
   Chcąc to sprawdzić przyjmijmy, że $g_1 g_2 = h$ jest iloczynem w grupie G. Zgodnie z definicją (122) dla dowolnego $g \in L_G$ mamy

   $$\bar{g}_2 \bar{g}_1 g = \bar{g}_2 (g g_1) = g g_1 g_2, \tag{123}$$

   co daje, że $gh = \bar{h} g$, gdzie $\bar{h} = \bar{g}_2 \bar{g}_1$.

2. Grupa $\overline{G}$ komutuje z G.
   Korzystając z definicji grupy wewnętrznej mamy:
$$g_1\bar{g}_2 g = g_1 g g_2,\ g \in L_G, \tag{124}$$
   gdzie g_1 jest operatorem działający na L_G.
   Ponieważ $g_1 g g_2 = \bar{g}_2(g_1 g) = \bar{g}_2 g_1 g$, więc otrzymujemy $g_1\bar{g}_2 g = \bar{g}_2 g_1 g$. Zatem dla dowolnego $g \in L_G$ zachodzi $g_1\bar{g}_2 = \bar{g}_2 g_1$. Więc mamy, że grupy G i $\overline{G}$ komutują.

Powyższe własności zgadzają się z tym co zostało przedstawione w [56].

W [7, 8] zostały wyprowadzone działania grupy wewnętrznej $\overline{SO(3)}$ na funkcje Wignera:
$$\bar{g}D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega) = D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega g^{-1}) = \sum_{\mu'} D^{\lambda}_{\mu'\nu}(g^{-1})D^{\lambda}_{\mu\mu'}(\Omega), \tag{125}$$
które w naszym przypadku użyte są do opisu ruchu rotacyjnego jądra atomowego. Rozważania dotyczące grupy wewnętrznej przedstawione w [7, 8] były przeprowadzone jedynie dla zmiennych opisujących rotację. W naszym przypadku dodatkowo potrzebne jest działanie grupy wewnętrznej $\overline{SO(3)}$ na zmienne kolektywne $\alpha_{\lambda\mu}$, $\alpha^{lab}_{\lambda\mu}$. Poniżej przedstawione są wyprowadzenia potrzebne do dalszych obliczeń, [57].

W tym celu potrzebne są wzory transformacyjne dla funkcji sferycznych opisujących działanie grupy $SO(3)$ w układzie laboratoryjnym:
$$hY_{\lambda\mu}(\theta^{lab},\phi^{lab}) = \textstyle\sum_{\mu'} D^{\lambda}_{\mu'\mu}(h)Y_{\lambda\mu'}(\theta^{lab},\phi^{lab}),\ h \in SO(3), \tag{126}$$
oraz opisujące przekształcenie do układu wewnętrznego:
$$Y_{\lambda\mu}(\theta,\phi) = \textstyle\sum_{\mu'} D^{\lambda}_{\mu'\mu}(\Omega)Y_{\lambda\mu'}(\theta^{lab},\phi^{lab}), \tag{127}$$
gdzie Ω są kątami Eulera określającymi położenie układu wewnętrznego względem laboratoryjnego, [49].

Poza tym, ze względu na to, że grupa wewnętrzna $\overline{SO(3)}$ jest również grupą obrotów można zapisać:
$$\bar{g}Y_{\lambda\mu}(\theta^{lab},\phi^{lab}) = \sum_{\mu'} u^{\lambda}_{\mu'\mu}(\bar{g})Y_{\lambda\mu'}(\theta^{lab},\phi^{lab}),\ \bar{g} \in \overline{SO(3)}, \tag{128}$$
gdzie $u^{\lambda}_{\mu'\mu}(\bar{g})$ jest funkcją, której postaci na razie nie znamy. Wiedząc, że grupy $SO(3)$ oraz $\overline{SO(3)}$ komutują możemy porównać prawe strony następujących równości:
$$(\bar{g}h)Y_{\lambda\mu}(\theta^{lab},\phi^{lab}) = \textstyle\sum_{\mu''}\left(\sum_{\mu'} u^{\lambda}_{\mu''\mu'}(\bar{g})D^{\lambda}_{\mu'\mu}(h)\right)Y_{\lambda\mu''}(\theta^{lab},\phi^{lab}), \tag{129}$$
$$(h\bar{g})Y_{\lambda\mu}(\theta^{lab},\phi^{lab}) = \textstyle\sum_{\mu''}\left(\sum_{\mu'} u^{\lambda}_{\mu'\mu}(\bar{g})D^{\lambda}_{\mu''\mu'}(h)\right)Y_{\lambda\mu''}(\theta^{lab},\phi^{lab}), \tag{130}$$

co daje równość $\sum_{\mu'} u^{\lambda}_{\mu''\mu'}(\overline{g}) D^{\lambda}_{\mu'\mu}(h) = \sum_{\mu'} u^{\lambda}_{\mu'\mu}(\overline{g}) D^{\lambda}_{\mu''\mu'}(h)$ dla każdego $h \in SO(3)$ i $\overline{g} \in \overline{SO(3)}$. Ze względu na to, że funkcje Wignera tworzą zupełny zbiór funkcji w $L^2(SO(3))$, z ostatniej równości otrzymujemy $u^{\lambda}_{\mu\mu'}(\overline{g}) = \delta_{\mu\mu'}$ dla każdego $\overline{g} \in \overline{SO(3)}$. Zatem ze wzoru (128) mamy, że działanie dowolnego obrotu $\overline{g}$ z grupy wewnętrznej $\overline{SO(3)}$ nie zmienia postaci laboratoryjnej funkcji sferycznej, tj. $\overline{g} Y_{\lambda\mu}(\theta^{lab}, \phi^{lab}) = Y_{\lambda\mu}(\theta^{lab}, \phi^{lab})$. Wiedząc o tym, możemy podziałać grupą $\overline{SO(3)}$ na równanie opisujące powierzchnię jądrową w układzie laboratoryjnym (117), która jest niezmiennicza pod działaniem dowolnej grupy obrotów. Porównując ją z powierzchnią początkową otrzymujemy wzór opisujący działanie grupy wewnętrznej na zmienne $\alpha^{lab}_{\lambda\mu}$:

$$\overline{g} \alpha^{lab}_{\lambda\mu} = \alpha^{lab}_{\lambda\mu}. \tag{131}$$

Podobnie jak dla funkcji sferycznych $Y_{\lambda\mu}(\theta^{lab}, \phi^{lab})$ otrzymujemy, że $\alpha^{lab}_{\lambda\mu}$ jest niezmiennicze pod działaniem grupy wewnętrznej.

Korzystając z otrzymanych własności można znaleźć wzory opisujące działanie $\overline{SO(3)}$ na funkcje sferyczne oraz deformacje w układzie wewnętrznym:

$$\begin{aligned} \overline{g} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) &= \overline{g} \sum_{\mu'} D^{\lambda}_{\mu'\mu}(\Omega) Y_{\lambda\mu'}(\theta^{lab}, \phi^{lab}) \\ &= \sum_{\mu'} \left[\overline{g} D^{\lambda}_{\mu'\mu}(\Omega)\right] \left[\overline{g} Y_{\lambda\mu'}(\theta^{lab}, \phi^{lab})\right] = \sum_{\mu'} D^{\lambda}_{\mu'\mu}(g^{-1}) Y_{\lambda\mu'}(\theta, \phi) \end{aligned} \tag{132}$$

oraz

$$\begin{aligned} \overline{g} \alpha_{\lambda\mu} &= \overline{g} \sum_{\mu'} D^{\lambda}_{\mu'\mu}(\Omega) \alpha^{lab}_{\lambda\mu'} \\ &= \sum_{\mu'} \left[\overline{g} D^{\lambda}_{\mu'\mu}(\Omega)\right] \left[\overline{g} \alpha^{lab}_{\lambda\mu'}\right] = \sum_{\mu'} D^{\lambda}_{\mu'\mu}(g^{-1}) \alpha_{\lambda\mu'}, \end{aligned} \tag{133}$$

gdzie $\alpha_{\lambda\mu} = \sum_{\mu'} D^{\lambda}_{\mu'\mu}(\Omega) \alpha^{lab}_{\lambda\mu'}$.

Analogicznie jak dla (131) można pokazać działanie grupy $SO(3)$ na wewnętrzne zmienne kolektywne $\alpha_{\lambda\mu}$:

$$g \alpha_{\lambda\mu} = \alpha_{\lambda\mu}, \; g \in SO(3). \tag{134}$$

Z powyższych rozważań widać, że działanie grupy wewnętrznej można zapisać za pomocą odpowiadającej jej grupy laboratoryjnej. Wynika to z faktu, że dla dowolnej grupy G i jej odpowiadajacej grupie wewnętrznej $\overline{G}$ istnieje antyizomorfizm. Związek ten pomiędzy grupami laboratoryjnymi i wewnętrznymi jest wykorzystywany również w dalszej części pracy.

Oprócz działań grupy wewnętrznej na wewnętrzne zmienne kolektywne potrzebna jest również definicja działania tej grupy na funkcje zależne od zmiennych wewnętrznych $(\{\alpha_{\lambda\mu}\}, \Omega)$. Została ona wprowadzona następująco [57]:

Definicja 2. *Działanie na funkcję wewnętrznych zmiennych kolektywnych obrotu $\overline{g}$ z grupy wewnętrznej $\overline{G} \subseteq \overline{SO(3)}$ określone jest za pomocą odpowiadającemu mu elementowi g z grupy laboratoryjnej $G \subseteq SO(3)$ zgodnie ze wzorem:*

$$\overline{g}\phi(\{\alpha_{\lambda\mu}\}, \Omega) = \phi(\{\overline{g}\alpha_{\lambda\mu}\}, \overline{g}\Omega) = \phi(\{\sum_{\mu'} D^{\lambda}_{\mu'\mu}(g^{-1})\alpha_{\lambda\mu'}\}, \Omega g^{-1}). \tag{135}$$

3.1 Przykłady grup symetryzacji dla kolektywnych zmiennych kwadrupolowych i oktupolowych

W zależności od wyboru warunków określających układ wewnętrzny $f_k(\alpha_{\lambda\mu}, \Omega) = 0, \;\; k = 1, 2, 3$ oraz wyboru podzbioru zmiennych kolektywnych można otrzymać różne układy wewnętrzne oraz różne grupy symetryzacji $\overline{G}_s$.

Ze względu na to, że grupa symetryzacji $\overline{G}_s$ działa na zmienne wibracyjno-rotacyjne, zatem jest podgrupą iloczynu trzech grup wewnętrznych, które odpowiednio działają w przestrzeni kwadrupolowej $\overline{G}_{\alpha_2}$, oktupolowej $\overline{G}_{\alpha_3}$ oraz rotacyjnej $\overline{SO(3)}_{\Omega}$:

$$\overline{G}_{\alpha_2} \times \overline{G}_{\alpha_3} \times \overline{SO(3)}_{\Omega} \supset \overline{SO(3)} \supset \overline{G}_s, \tag{136}$$

gdzie $\overline{SO(3)}$ reprezentuje wspólne obroty zmiennych kwadrupolowych, oktupolowych i rotacyjnych.

Poniżej przedstawionych jest kilka przykładów wyborów układu wewnętrznego oraz uzyskanych grup symetryzacji dla zmiennych kwadrupolowych i oktupolowych.

Grupy symetryzacji uzyskane są z transformacji (118), przy założeniu, że nie ma warunków wiążących różne wartości λ. Przykładem takiego wyboru układu wewnętrznego jest zaproponowany przez Bohra wybór zmiennych kwadrupolowych, dla których zachodzi $\alpha_{2\pm1} = 0, \alpha_{22} = \alpha_{2-2}$.

Istnieje również możliwość analizy sytuacji, kiedy liczba nałożonych warunków $f_k(\{\alpha_{\lambda\mu}\}, \Omega) = 0$ jest większa od wymaganych trzech. Wówczas pozostałe równania opisują pewną podprzestrzeń zmiennych kolektywnych, która im odpowiada. Ograniczenie podprzestrzeni zmiennych kolektywnych w układzie wewnętrznym powoduje pojawienie się zależności pomiędzy zmiennymi w układzie laboratoryjnym.

Przykładem większej liczby nałożonych warunków na zmienne wewnętrzne może być przestrzeń kwadrupolowo-oktupolowa, dla której $\alpha_{20},\ \alpha_{30}$ przyjmują wartości rzeczywiste, $\alpha_{3\pm3}$ zespolone, natomiast pozostałe zmienne spełniają następujące waruki: $\alpha_{22} = \alpha_{2-2},\ \alpha_{2\pm1} = 0$ oraz $\alpha_{3\pm1} = 0,\ \alpha_{32} = \alpha_{3-2}$.

Aby ułatwić korzystanie z wewnętrznych zmiennych kolektywnych wprowadzony jest następujący zapis, który dla omawianego przykładu ma postać:

$$\{\alpha_{20}, \alpha_{2\pm1} = 0, \alpha_{22} = \alpha_{2-2}, \alpha_{30}, \alpha_{3\pm1} = 0, \alpha_{32} = \alpha_{3-2}, \alpha_{3\pm3}\}_f, \tag{137}$$

gdzie w nawiasie wypisane są wszystkie zmienne opisujące ruch wibracyjny wraz ze wszystkimi warunkami $f_k(\{\alpha_{\lambda\mu}\}, \Omega) = 0$, co jest oznaczone indeksem dolnym f. W przypadku, gdy mamy przestrzeń kwadrupolowo-oktupolową, wówczas warunki opisujące część kwadrupolową (oktupolową) oznaczone są $f^{(2)}$ ($f^{(3)}$).

Jeśli przy zmiennej nie ma wypisanych jawnie warunków spełnionych w układzie wewnętrznym, jak dla α_{20} czy $\alpha_{3\pm3}$, wówczas przebiega ona pełny zakres wartości.

Taki schemat opisu wewnętrznych zmiennych kolektywnych używany jest w dalszej części pracy.

W omawianym przykładzie zmiennych wewnętrznych układ wewnętrzny może być opisany np. przez standardowe warunki $\alpha_{22} = \alpha_{2-2}, \alpha_{2\pm1} = 0$, gdzie związek pomiędzy kwadrupolowymi zmiennymi wewnętrznymi i laboratoryjnymi ma postać:

$$\alpha_{2\mu} = \sum_{\mu'=-2}^{2} D^2_{\mu'\mu}(\Omega)\alpha^{lab}_{2\mu'}. \tag{138}$$

Wówczas pięciowymiarowa przestrzeń kwadrupolowa redukuje się do podprzestrzeń dwuwymiarowej, w której zmiennymi niezależnymi są rzeczywiste zmienne α_{20}, α_{22}. Pozostałe trzy wymiary zastąpione są przez trzy kąty Eulera $\Omega = (\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)$ opisujące położenie układu wewnętrznego względem laboratoryjnego. Zatem otrzymany w ten sposób układ wewnętrzy określony jest przez dwie zmienne kwadrupolowe α_{20}, α_{22} oraz kąty Eulera Ω.

Naszym celem jest otrzymanie jednoznacznej transformacji pomiędzy układami, zatem trzeba znaleźć grupę $\overline{G}$, która zachowuje warunki opisujące układ wewnętrzny oraz zapewnia otrzymanie stanów fizycznych. Dla przedstawionego układu wewnętrznego jest to grupa $\overline{G} = \overline{O}_h$, składająca się z 48 obrotów (dodatek A).

Przy takim opisie układu wewnętrznego dodatkowe warunki opisujące podprzestrzeń oktupolową powodują ograniczenie wykorzystywanych wewnętrznych zmiennych oktupolowych. Odpowiada to fragmentowi przestrzeni opisanej przez zmienne oktupolowe w układzie laboratoryjnym:

$$\begin{gathered} \textstyle\sum_{\mu'} D^3_{\mu'\mu}(\Omega)\alpha^{lab}_{3\mu'} = 0,\ \mu = \pm1, \\ \textstyle\sum_{\mu'} D^3_{\mu'2}(\Omega)\alpha^{lab}_{3\mu'} = \sum_{\mu'} D^3_{\mu'-2}(\Omega)\alpha^{lab}_{3\mu'}. \end{gathered} \tag{139}$$

W praktyce, w większości zastosowań, znajomość warunków opisujących podzbiór $\{\alpha^{lab}_{\lambda\mu}\}$ nie jest dla nas istotna. Dlatego dla omawianego przykładu nie jest dla nas ważna dokładna znajomość postaci laboratoryjnej podprzestrzeni oktupolowej.

Ponieważ problem niejednoznaczności dotyczy wyboru wszystkich zmiennych wewnętrznych, zatem trzeba znaleźć grupę symetryzacji która oprócz zachowania warunków opisujących układ wewnętrzny jednocześnie nie wyprowadza zmiennych poza wybraną podprzestrzeń oktupolową. Oznacza to, że szukana grupa symetryzacji jest albo znalezioną grupą wewnętrzną albo jej podgrupą.

W opisywanym przykładzie grupą symetryzacji $\overline{G}_s$ jest grupa $\overline{D}_{4;z}$, składająca się tylko z ośmiu obrotów właściwych (dodatek A).

W rozważanym przykładzie, alternatywną możliwością wyboru warunków opisujących układ wewnętrzny są $\alpha_{3\pm1} = 0,\ \alpha_{32} = \alpha_{3-2}$. Wówczas transformacja z układu laboratoryjnego do wewnętrznego opisana jest przez siedem niezależnych laboratoryjnych zmiennych oktupolowych:

$$\alpha_{3\mu} = \sum_{\mu'=-3}^{3} D^2_{\mu'\mu}(\Omega)\alpha^{lab}_{3\mu'}. \tag{140}$$

Układ wewnętrzny opisany jest wtedy przez następujące zmienne $\alpha_{30}, \alpha_{32} \in \mathbb{R}$, $\alpha_{3\pm3} \in \mathbb{C}$ oraz trzy kąty Eulera Ω.

Grupą zachowującą transformację do nowego układu wewnętrznego jest grupa $\overline{D}_{4;z}$ składająca się z ośmiu obrotów. Jak widać taki wybór układu wewnętrznego powoduje otrzymanie o wiele mniejszej grupy obrotów niż w przypadku standardowego wyboru układu wewnętrznego.

Do pełnego opisu potrzebna jest jeszcze przestrzeń zmiennych kwadrupolowych. Jest ona ograniczona do podprzestrzeni, krórej odpowiadają w układzie wewnętrznym warunki $\alpha_{22} = \alpha_{2-2}, \alpha_{2\pm1} = 0$, co można zapisać jako:

$$\begin{aligned} \textstyle\sum_{\mu'} D^2_{\mu'\mu}(\Omega)\alpha^{lab}_{2\mu'} = 0,\ \mu = \pm1, \\ \textstyle\sum_{\mu'} D^2_{\mu'2}(\Omega)\alpha^{lab}_{2\mu'} = \sum_{\mu'} D^2_{\mu'-2}(\Omega)\alpha^{lab}_{2\mu'}. \end{aligned} \tag{141}$$

Grupą symetrii zachowującą wszystkie warunki nałożone na zmienne w układzie wewnętrznym jest grupa $\overline{D}_{4;z}$, która jest identyczna z grupą otrzymaną dla warunków opisujących układ wewnętrzny.

W obu rozważanych przypadkach mamy identyczne wewnętrzne zmienne kolektywne, a zatem i grupę symetryzacji $\overline{G}_s$. Jak widać otrzymana grupa $\overline{G}_s$ nie zależy od tego jakie wybierzemy warunki opisujące układ wewnętrzny.

Ponieważ zmienne kwadrupolowe i oktupolowe nie są powiązane ze sobą za pomocą jakichkolwiek równań, zatem warunki nałożone na zmienne wewnętrzne $f_k(\{\alpha_{\lambda\mu}\},\Omega) = 0$, $k = 1,2,\ldots,K$ mogą być rozłożone na dwa zbiory funkcji o mocy M i N oraz $M + N = K$:

(1) Opisujący ograniczenia nałożone na zmienne kwadrupolowe oraz kąty Eulera, które oznaczone są jako:

$$f_m^{(2)}(\{\alpha_{2\mu}\},\Omega) = 0, \quad m = 1,2,\ldots,M. \tag{142}$$

Grupa otrzymana z tych warunków oznaczona jest jako $\overline{G}^{(2)}$. Do znalezienia tej grupy nie są brane pod uwagę warunki narzucone na zmienne oktupolowe.

(2) Określa ograniczenia nałożone na zmienne oktupolowe i kąty Eulera:

$$f_n^{(3)}(\{\alpha_{3\mu}\},\Omega) = 0, \quad m = 1,2,\ldots,N. \tag{143}$$

Jest ona oznaczona jest jako $\overline{G}^{(3)}$. Analogicznie jak dla wcześniejszego przypadku $\overline{G}^{(3)}$ nie uwzględnia warunków narzuconych na zmienne kwadrupolowe.

Grupa symetryzacji $\overline{G}_s$, którą otrzymuje się dla wszystkich warunków $f_k(\{\alpha_{\lambda\mu}\},\Omega) = 0$ jest grupą, która składa się elementów, które jednocześnie obracają wszystkie zmienne.

Oczywiście zwiększając liczbę zmiennych, przez dodanie kolejnych wartości λ, grupę $\overline{G}_s$ tworzą jedynie takie działania, które pojawią się w każdej z otrzymanych grup dla każdego z λ.

Poniżej w tabelach 1 i 2 przedstawione są otrzymane grupy $\overline{G}^{(2)}$ i $\overline{G}^{(3)}$ dla wybranych zmiennych kwadrupolowych i oktupolowych. Używane w dalszej części grupy oraz oznaczenia ich elementów wyjaśnione są w dodatku A.

wewnętrzne zmienne kwadrupolowe	grupa $\overline{G}^{(2)}$
$\{\alpha_{20},\alpha_{22},\alpha_{2-2},\alpha_{21},\alpha_{2-1}\}_{f^{(2)}}$	$\overline{SO(3)}$
$\{\alpha_{20},\alpha_{22}=\alpha_{2-2},\alpha_{2\pm1}=0\}_{f^{(2)}}$	$\overline{O}_h$
$\{\alpha_{20},\alpha_{22}=-\alpha_{2-2},\alpha_{2\pm1}=0\}_{f^{(2)}}$	$\overline{D}_{4h}$
$\{\alpha_{20},\alpha_{22}=\alpha_{2-2}=0,\alpha_{21}=\alpha_{2-1}\}_{f^{(2)}}$ $\{\alpha_{20},\alpha_{22}=\alpha_{2-2}=0,\alpha_{21}=-\alpha_{2-1}\}_{f^{(2)}}$	$\overline{D}_2$

Tablica 1: Grupy wewnętrzne dla wybranych warunków określających zmienne kwadrupolowe

wewnętrzne zmienne oktupolowe	grupa $\overline{G}^{(3)}$
$\{\alpha_{30}, \alpha_{31}, \alpha_{3-1}, \alpha_{32}, \alpha_{3-2}, \alpha_{33}, \alpha_{3-3}\}_{f^{(3)}}$	$\overline{SO(3)}$
$\{\alpha_{30}, \alpha_{32} = -\alpha_{3-2}, \alpha_{3\pm1} = \alpha_{3\pm3} = 0\}_{f^{(3)}}$ $\{\alpha_{30}, \alpha_{3\pm1} = 0, \alpha_{32} = \alpha_{3-2}, \alpha_{33}, \alpha_{3-3}\}_{f^{(3)}}$ $\{\alpha_{30}, \alpha_{31}, \alpha_{3-1}, \alpha_{32} = \alpha_{3-2}, \alpha_{33} = \alpha_{3-3} = 0\}_{f^{(3)}}$	$\overline{D}_{4;z}$
$\{\alpha_{30}, \alpha_{31} = -\alpha_{3-1}, \alpha_{32} = \alpha_{3-2}, \alpha_{33} = -\alpha_{3-3}\}_{f^{(3)}}$	$\overline{D}_{4;y}$
$\{\alpha_{30}, \alpha_{31} = \alpha_{3-1}, \alpha_{32}, \alpha_{3-2}, \alpha_{33} = \alpha_{3-3} = 0\}_{f^{(3)}}$ $\{\alpha_{30}, \alpha_{31} = \alpha_{3-1}, \alpha_{32} = \alpha_{3-2} = 0, \alpha_{33}, \alpha_{3-3}\}_{f^{(3)}}$	$\overline{D}_2$
$\{\alpha_{30} = 0, \alpha_{31} = \alpha_{3-1} = 0, \alpha_{32} = \alpha_{3-2}, \alpha_{33} = \alpha_{3-3} = 0\}_{f^{(3)}}$	$\overline{R_z(\frac{\pi}{4})OR_z(-\frac{\pi}{4})}$

Tablica 2: Grupy wewnętrzne dla wybranych warunków określających zmienne oktupolowe

Zgodnie z tym co zostało przedstawione powyżej zostały otrzymane następujące grupy symetryzacji $\overline{G}_s$ w przestrzeni kwadrupolowo-oktupolowej:

(i) dla kwadrupoli $\{\alpha_{20}, \alpha_{22} = \alpha_{2-2}, \alpha_{2\pm1} = 0\}_{f^{(2)}}$ oraz

  (a) oktupoli $\{\alpha_{30}, \alpha_{32} = -\alpha_{3-2}, \alpha_{3\pm1} = \alpha_{3\pm3} = 0\}_{f^{(3)}}$, $\{\alpha_{30}, \alpha_{3\pm1} = 0, \alpha_{32} = \alpha_{3-2}, \alpha_{33}, \alpha_{3-3}\}_{f^{(3)}}$ oraz $\{\alpha_{30}, \alpha_{31}, \alpha_{3-1}, \alpha_{32} = \alpha_{3-2}, \alpha_{33} = \alpha_{3-3} = 0\}_{f^{(3)}}$, $\{\alpha_{30} = 0, \alpha_{31} = \alpha_{3-1} = 0, \alpha_{32} = \alpha_{3-2}, \alpha_{33} = \alpha_{3-3} = 0\}_{f^{(3)}}$ uzyskaną grupą symetryzacji jest $\overline{G}_s = \overline{D}_{4;z}$,

  (b) oktupoli $\{\alpha_{30}, \alpha_{31} = -\alpha_{3-1}, \alpha_{32} = \alpha_{3-2}, \alpha_{33} = -\alpha_{3-3}\}_{f^{(3)}}$ grupa symetryzacji jest $\overline{G}_s = \overline{D}_{4;y}$,

  (c) oktupoli $\{\alpha_{30}, \alpha_{31} = \alpha_{3-1}, \alpha_{32}, \alpha_{3-2}, \alpha_{33} = \alpha_{3-3} = 0\}_{f^{(3)}}$ i $\{\alpha_{30}, \alpha_{31} = \alpha_{3-1}, \alpha_{32} = \alpha_{3-2} = 0, \alpha_{33}, \alpha_{3-3}\}_{f^{(3)}}$ grupa symetryzacji wynosi $\overline{G}_s = \overline{D}_2$,

  (d) wszystkich oktupoli otrzymaną grupą symetryzacji jest $\overline{G}_s = \overline{O}$,

(ii) dla kwadrupoli $\{\alpha_{20}, \alpha_{22} = -\alpha_{2-2}, \alpha_{2\pm1} = 0\}_{f^{(2)}}$ oraz

  (a) oktupoli $\{\alpha_{30}, \alpha_{32} = -\alpha_{3-2}, \alpha_{3\pm1} = \alpha_{3\pm3} = 0\}_{f^{(3)}}$, $\{\alpha_{30}, \alpha_{3\pm1} = 0, \alpha_{32} = \alpha_{3-2}, \alpha_{33}, \alpha_{3-3}\}_{f^{(3)}}$ oraz $\{\alpha_{30}, \alpha_{31}, \alpha_{3-1}, \alpha_{32} = \alpha_{3-2}, \alpha_{33} = \alpha_{3-3} = 0\}_{f^{(3)}}$ grupą symetryzacji opisana jest przez $\overline{G}_s = \overline{D}_{4;z}$,

  (b) oktupoli $\{\alpha_{30}, \alpha_{31} = -\alpha_{3-1}, \alpha_{32} = \alpha_{3-2}, \alpha_{33} = -\alpha_{3-3}\}_{f^{(3)}}$, $\{\alpha_{30}, \alpha_{31} = \alpha_{3-1}, \alpha_{32}, \alpha_{3-2}, \alpha_{33} = \alpha_{3-3} = 0\}_{f^{(3)}}$ i $\{\alpha_{30}, \alpha_{31} = \alpha_{3-1}, \alpha_{32} = \alpha_{3-2} = 0, \alpha_{33}, \alpha_{3-3}\}_{f^{(3)}}$, $\{\alpha_{30} = 0, \alpha_{31} = \alpha_{3-1} = 0, \alpha_{32} = \alpha_{3-2}, \alpha_{33} = \alpha_{3-3} = 0\}_{f^{(3)}}$ grupa symetryzacji wynosi $\overline{G}_s = \overline{D}_2$,

(c) wszystkich oktupoli $\{\alpha_{3\mu}\}$ grupą symetryzacji jest $\overline{G}_s = \overline{D}_{4;y}$,

(iii) dla kwadrupoli $\{\alpha_{20}, \alpha_{22} = \alpha_{2-2} = 0, \alpha_{21} = \pm\alpha_{2-1}\}_{f^{(2)}}$ i dla dowolnego wyboru wewnętrznych zmiennych oktupolowych przedstawionych w tabeli otrzymujemy grupę $\overline{G}_s = \overline{D}_2$,

(iv) dla wszystkich zmiennych kwadrupolowych $\{\alpha_{2\mu}\}$ grupa symetryzacji jest identyczna z grupą $\overline{G}^{(3)}$ otrzymaną dla odpowiednich zmiennych oktupolowych.

Istotną różnicą pomiędzy otrzymanymi grupami dla zmiennych kwadrupolowych $\{\alpha_{2\mu}\}$ i oktupolowych $\{\alpha_{3\mu}\}$ jest występowanie inwersji I.

Z definicji działania inwersji na wewnętrzne zmienne $\alpha_{\lambda\mu}$: $I\alpha_{\lambda\mu} = (-1)^{\lambda}\alpha_{\lambda\mu}$ widać, że gdy λ jest nieparzysta pojawia się przeciwny znak dla $\alpha_{\lambda\mu}$. Daje to inny wynik niż dla parzystych wartości λ, dla których nie następuje zmiana znaku.

Oznacza to, że inwersja I może wchodzić do grupy $\overline{G}^{(2)}$, a w przypadku $\overline{G}^{(3)}$ nie jest to możliwe.

W dalszej części pracy ważną rolę odgrywają dwie, z przedstawionych powyżej przestrzeni kwadrupolowo-oktupolowych, których wewnętrzne zmienne opisane są przez następujące zbiory:

(i) Zbiór $\{\alpha_{20}, \alpha_{2\pm1} = 0, \alpha_{22} = \alpha_{2-2}, \alpha_{30}, \alpha_{3\pm1}, \alpha_{3\pm2}, \alpha_{3\pm3}\}_f$. Zgodnie z tym co zostało przedstawione powyżej grupą symetryzacji jest grupa $\overline{G}_s = \overline{O}$. Tak wybrana przestrzeń użyta jest w dalszej części do konstrukcji modelu kolektywnego o zmiennych zespolonych oznaczonego za pomocą litery (Z).

(ii) Zbiór $\{\alpha_{20}, \alpha_{2\pm1} = 0, \alpha_{22} = \alpha_{2-2}, \alpha_{30}, \alpha_{31} = -\alpha_{3-1}, \alpha_{32} = \alpha_{3-2}, \alpha_{33} = -\alpha_{3-3}\}_f$. Grupą symetryzacji dla tego wyboru zmiennych jest $\overline{G}_s = \overline{D}_{4;y}$. Model budowany na tak wybranej przestrzeni kolektywnej nazwany jest w dalszej części modelem kolektywnym o zmiennych rzeczywistych i oznaczony jest przez (R).

Powyższe oznaczenia ((Z),(R)) wykorzystywane są zarówno do oznaczenia skonstruowanych modeli oraz podczas analizy transformacji pomiędzy powierzchniami jądrowymi opisanymi przez wybrane zbiory wewnętrznych zmiennych kolektywnych.

3.2 Grupa symetryzacji w przypadku występowania „zamrożonych" kwadrupolowych zmiennych kolektywnych

W tym podrozdziale opisana jest sytuacja, w której część zmiennych kolektywnych jest „zamrożona", to znaczy posiada ustaloną wartość i staje się parametrem modelu. Pokazane jest to na dobrze znanym przykładzie zmiennych kwadrupolowych. Przedstawione są też pewne konsekwencje rozszerzenia tego modelu o zmienne oktupolowe.

Uogólnienie na dowolny przypadek jest bezpośredni.

Rozważmy zatem model kolektywny $\{\alpha_{20}, \alpha_{22} = \alpha_{2-2}, \alpha_{2\pm1} = 0\}_{f^{(2)}}$.

Tradycyjnie w fizyce jądrowej zamiast zmiennych α_{20}, α_{22} używa się zmiennych kolektywnych β_2, γ, [50, 51]. Przyjmijmy, że rozważamy kształty jądrowe o statycznej deformacji $\gamma = \gamma_0$. Wtedy:

$$\alpha_{20} = \beta_2 \cos(\gamma_0),\ \alpha_{22} = \alpha_{2-2} = \frac{\beta_2}{\sqrt{2}} \sin(\gamma_0), \tag{144}$$

gdzie $\beta_2^2 = \alpha_{20}^2 + 2\alpha_{22}^2$. Zatem mamy tylko jedną zmienną opisująca część kwadrupolową, jest nią β_2.

Grupa $\overline{G}^{(2)}$ otrzymana dla części kwadrupolowej $\{\beta_2, \gamma = \gamma_0\}_{f^{(2)}}$ wymaga rozważenia dwóch przypadków wartości parametru γ_0:

(i) gdy $\gamma_0 = 0, \pi$ otrzymujemy $\{\alpha_{20},\ \alpha_{22} = \alpha_{2-2} = \alpha_{21} = \alpha_{2-1} = 0\}_{f^{(2)}}$ oraz grupę $\overline{G}^{(2)} = \overline{D}_\infty$, gdzie osią główną jest oś OZ,

(ii) dla $\gamma_0 \neq 0, \pi$ część kwadrupolowa ma postać $\{\alpha_{22} = \alpha_{2-2} \neq 0, \alpha_{20}, \alpha_{2\pm1} = 0\}_{f^{(2)}}$, ale należy rozważyć trzy podprzypadki:

1. Dla $\sin(\gamma_0) = \sqrt{3}\cos(\gamma_0)$, czyli dla $\gamma_0 = \frac{\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$ otrzymujemy grupę $\overline{G}^{(2)} = \overline{D}_\infty$ z osią główną OY.
2. Dla $\sin(\gamma_0) = -\sqrt{3}\cos(\gamma_0)$, co jest równoważne $\gamma_0 = \frac{2\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$ również otrzymujemy $\overline{G}^{(2)} = \overline{D}_\infty$ z osią główną OY.
3. Dla dowolnego $\gamma_0 \neq 0, \pi$, gdy nie ma żadnych związków pomiędzy $\sin(\gamma_0)$ oraz $\cos(\gamma_0)$, otrzymujemy grupę $\overline{G}^{(2)} = \overline{D}_2 = \{E, C_{2x}, C_{2y}, C_{2z}\}$.

Jeżeli rozszerzymy powyższy model o zmienne oktupolowe $\{\alpha_{32} = \alpha_{3-2}, \alpha_{30} = \alpha_{3\pm3} = \alpha_{3\pm1} = 0\}_{f^{(3)}}$, musimy uwzględnić dodatkowo oktupolową grupę oktaedralną $\overline{G}^{(3)} = \overline{O}$.

Dla przestrzeni, w której ruch wibracyjny opisany jest przez zmienne oktupolowe $\{\alpha_{32} = \alpha_{3-2}, \alpha_{30} = \alpha_{3\pm3} = \alpha_{3\pm1} = 0\}_{f^{(3)}}$ oraz część kwadrupolową $\{\beta_2, \gamma = \gamma_0\}_{f^{(2)}}$ grupa symetryzacji jest następująca:

(i) dla $\{\beta_2, \gamma = \gamma_0 = 0, \pi\}_{f(2)}$ grupą symetryzacji jest $\overline{G}_s = \overline{D_{4;z}} = \{E, C_{2x}, C_{2y}, C_{2z}, C_{4z}, C_{4z}^{-1}, C_{2a}, C_{2b}\}$,

(ii) dla $\{\beta_2, \gamma = \gamma_0 \neq 0, \pi\}_{f(2)}$ otrzymujemy $\overline{G}_s = \overline{D_2} = \{E, C_{2x}, C_{2y}, C_{2z}\}$.

Zmniejsze liczby zmiennych kwadrupolowych wynikające z przyjęcia $\gamma_0 = 0, \pi$ powoduje otrzymanie większej grupy $\overline{G}_s$ niż dla przypadku $\gamma_0 \neq 0, \pi$. Otrzymany ostatni wynik związany jest również z dołączeniem odpowiednich zmiennych oktupolowych.

Otrzymane powyżej grupy dla układu wewnętrznego można znaleźć w dodatku A, a odpowiadające im grupy w układzie laboratoryjnym np. w [2, 9, 10, 11]

4 Przykładowe transformacje pomiędzy wybranymi zbiorami zmiennych kolektywnych

W tym rozdziale przedstawione są transformacje pomiędzy dwoma różnymi zbiorami wewnętrznych zmiennych kolektywnych opisujących powierzchnię jądrową. Pierwszy z opisanych przykładów dotyczy jedynie wewnętrznych zmiennych kwadrupolowych. Dla nich nowy układ jest określony przez warunki, które ograniczają zmienne kolektywne $\{\alpha_{2\mu}\}$ do wartości rzeczywistych.

Druga część jest próbą odpowiedzi na pytanie czy wszystkie powierzchnie jądrowe otrzymane w zmiennych kwadrupolowych i pełnych zmiennych oktupolowych $\{\alpha_{3\mu}\}$ dają się odtworzyć używając w części oktupolowej jedynie zmiennych rzeczywistych. Szukane transformacje dotyczą identycznych układów wewnętrznych określonych warunkami $\alpha_{22} = \alpha_{2-2}, \alpha_{2\pm1} = 0$.

Powyższe przekształcenia można skonstruować na dwa sposoby. W każdym przypadku szukane transformacje są określone przez trzy kąty Eulera $\theta = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$, które mogą zależeć od wartości zmiennych $\alpha_{\lambda\mu}$.

Pierwsza metoda opiera się jedynie na znalezieniu takich obrotów, które spełniają układ równań:

$$\bar{\alpha}_{\lambda\mu} = \sum_{\mu'=-\lambda}^{\lambda} D^{\lambda}_{\mu\mu'}(\theta)^* \alpha_{\lambda\mu'}. \tag{145}$$

Zmienne $\{\bar{\alpha}_{\lambda\mu}\}$ i $\{\alpha_{\lambda\mu}\}$ należą odpowiednio do końcowego i początkowego układu wewnętrznego. W każdym z przypadku wyboru kwadrupolowych zmiennych wewnętrznych muszą być zachowane warunki zapewniające przynależność ich do odpowiedniego układu wewnętrznego. Metoda ta opiera się na działaniu grupy wewnętrznej na zmienne kolektywne.

Druga metoda opiera się na jawnym przekształceniu opisu powierzchni jądrowej przedstawionym w jednej z przestrzeni do drugiej. W tym podejściu $\{\alpha_{\lambda\mu}\}$ są parametrami, które określają kształt powierzchni jądra atomowego a zmiennymi, na które działa grupa wewnętrzna są funkcje sferyczne $Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)$. W tym przypadku szukane kąty Eulera otrzymuje się z porównania wyrażeń stojących przy tych samych funkcjach sferycznych.

Obie metody są równoważne, zatem nie jest istotne którą z nich się wykorzysta.

4.1 Transformacje pomiędzy dwoma różnymi układami wewnętrznymi w zmiennych kwadrupolowych

Rozważmy dwa układy wewnętrzne, w których zmienne kolektywne ograniczone są do zmiennych kwadrupolowych, co w praktyce fizyki jądrowej jest dosyć częstym przypadkiem:

$$\text{układ 1}: \quad \{\alpha_{20}, \alpha_{22} = \alpha_{2-2}, \alpha_{2\pm1} = 0\}_f, \tag{146}$$

$$\text{układ 2}: \quad \{\bar{\alpha}_{20}, \bar{\alpha}_{21} = -\bar{\alpha}_{2-1}, \bar{\alpha}_{2\pm2} = 0\}_f. \tag{147}$$

Chcemy sprawdzić, czy istnieje wzajemnie jednoznaczna transformacja pomiędzy tymi układami, tj. czy istnieją takie kąty Eulera $\theta = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ opisujące obrót lokalny, dla których zachodzi

$$\bar{\alpha}_{2\mu} = \left[D^2_{\mu-2}(\theta)^* + D^2_{\mu2}(\theta)^*\right] \alpha_{22} + D^2_{\mu0}(\theta)^* \alpha_{20}. \tag{148}$$

We wzorach transformacyjnych (148) należy uwzględnić warunki (147) definiujące drugi układ współrzędny:

$$\bar{\alpha}_{21} = -\bar{\alpha}_{2-1}, \bar{\alpha}_{2\pm2} = 0. \tag{149}$$

Wykorzystując jawną formę funkcji Wignera warunki te można zapisać w postaci:

$$\begin{gathered}
e^{i\theta_1} \sin(\theta_2) \left\{ \tfrac{1}{2} \left[-\left(1 - \cos(\theta_2)\right) e^{-i2\theta_3} + \left(1 + \cos(\theta_2)\right) e^{i2\theta_3} \right] \alpha_{22} - \right. \\
\left. - \sqrt{\tfrac{3}{2}} \cos(\theta_2) \alpha_{20} \right\} = -e^{-i\theta_1} \sin(\theta_2) \left\{ \tfrac{1}{2} \left[-\left(1 + \cos(\theta_2)\right) e^{-i2\theta_3} + \right. \right. \\
\left. \left. + \left(1 - \cos(\theta_2)\right) e^{i2\theta_3} \right] \alpha_{22} + \sqrt{\tfrac{3}{2}} \cos(\theta_2) \alpha_{20} \right\}, \\
e^{i2\theta_1} \tfrac{1}{2} \left\{ \tfrac{1}{2} \left[\left(1 - \cos(\theta_2)\right)^2 e^{-i2\theta_3} + \left(1 + \cos(\theta_2)\right)^2 e^{i2\theta_3} \right] \alpha_{22} + \right. \\
\left. + \sqrt{\tfrac{3}{2}} \sin^2(\theta_2) \alpha_{20} \right\} = 0, \\
e^{-i2\theta_1} \tfrac{1}{2} \left\{ \tfrac{1}{2} \left[\left(1 + \cos(\theta_2)\right)^2 e^{-i2\theta_3} + \left(1 - \cos(\theta_2)\right)^2 e^{i2\theta_3} \right] \alpha_{22} + \right. \\
\left. + \sqrt{\tfrac{3}{2}} \sin^2(\theta_2) \alpha_{20} \right\} = 0.
\end{gathered} \tag{150}$$

Rozwiązaniem powyższego układu równań są kąty Eulera $\theta = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ opisujące lokalny obrót zależny od wartości zmiennych α_{20} i α_{22}.

Z dwóch ostatnich równości układu (150) otrzymujemy dwa równania, które muszą być spełnione przez kąty θ_2 i θ_3:

$$(1 + \cos^2(\theta_2)) \cos(2\theta_3)\alpha_{22} + \sqrt{\tfrac{1}{2}} \sin^2(\theta_2)\alpha_{20} = 0, \tag{151}$$

$$\cos(\theta_2) \sin(2\theta_3)\alpha_{22} = 0. \tag{152}$$

Ponieważ chcemy sprawdzić czy istnieje transformacja pomiędzy układami wewnętrznymi (146,147), zatem wystarczy znaleźć tylko jedno możliwe przekształcenie dla wybranych kątów lokalnych $\theta = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$, które jest bijekcją.

Przymując z (152), że $\theta_2 = \frac{\pi}{2}$ otrzymujemy z (151) zależność θ_3 od α_{20} i α_{22}:

$$\cos(2\theta_3)\alpha_{22} + \sqrt{\frac{1}{2}}\alpha_{20} = 0. \tag{153}$$

Z powyższej równości otrzymujemy dwa przypadki. Pierwszy zachodzi, gdy $\alpha_{22} = 0$, wówczas $\alpha_{20} = 0$ oraz kąt θ_3 jest dowolny. Dla takich wartości otrzymujemy punkt w układzie wewnętrznym 2 o wartościach równych zero. W tym przypadku kąty θ mogą przyjmować wartości dowolne.

Drugą możliwością, którą będziemy dalej rozważać, jest $\alpha_{22} \neq 0$, która pozwala uzyskać wartość kąta θ_3 z równości $\cos(2\theta_3) = -\sqrt{\frac{3}{2}\frac{\alpha_{20}}{\alpha_{22}}}$.

Wykorzystując zapis biegunowy dla zmiennych $\alpha_{20} = \beta_2 \cos(\gamma)$, $\alpha_{22} = \beta_2 \frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\gamma)$ otrzymujemy wyrażenie na θ_3:

$$\cos(2\theta_3) = -\sqrt{3}\,\mathrm{ctg}(\gamma). \tag{154}$$

Ponieważ z lewej strony występuje funkcja kosinus, zatem dla prawej strony muszą zachodzić nierówności:

$$-\frac{\sqrt{3}}{3} \leq \mathrm{ctg}(\gamma) \leq \frac{\sqrt{3}}{3}, \tag{155}$$

które ograniczają zakres kąta γ do przedziałów

$$\gamma \in \left[\frac{\pi}{3}, \frac{2}{3}\pi\right] \cup \left[\frac{4}{3}\pi, \frac{5}{3}\pi\right]. \tag{156}$$

Każdy z otrzymanych przedziałów odpowiada jednemu z możliwych równoważnych zakresów kątów opisujących wszystkie kształty w układzie 1, (146).

W dalszej części wybrany jest przedział $\gamma \in \left[\frac{4}{3}\pi, \frac{5}{3}\pi\right]$.

Możliwość ograniczenia do jednego przedziału γ wynika z grupy symetryzacji $\overline{G}_s = \overline{O}_h$ działającej na zmienne β_2, γ w układzie wewnętrznym $\{\alpha_{20}, \alpha_{22} = \alpha_{2-2}, \alpha_{2\pm1} = 0\}_f$. Zmienna β_2 jest niezmiennikiem pod działaniem obrotów. Zatem grupa $\overline{O}_h$ będzie jedynie zmieniać kąt γ dając ich równoważne wartości określone przez relację równoważności dla kątów γ' i γ: $\gamma' = \overline{g}\gamma$, gdzie $\overline{g} \in \overline{O}_h$.[1]

Zbiór otrzymanych równoważnych kątów tworzy klasę równoważności nazywaną $\overline{O}_h$-orbitą, która dla układu 1. ma postać:

$$\mathrm{orb}_{\overline{O}_h}(\gamma) = \{\gamma, -\gamma, \gamma - \frac{4\pi}{3}, -\gamma + \frac{2\pi}{3}, \gamma - \frac{2\pi}{3}, -\gamma + \frac{4\pi}{3}\}. \tag{157}$$

Otrzymana orbita dzieli płaszczyznę $\beta_2\gamma$ na sześć równoważnych części odpowiadającym przedziałom $\gamma \in [\frac{k}{3}\pi, \frac{k+1}{3}\pi]$, $k = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ oraz $\beta_2 \geq 0$. Zatem wybrane przez nas wartości kąta γ należą do jednego z przedziałów otrzymanego z orbity grupy $\overline{O}_h$. Pozostałe wartości kątów θ_2 i θ_3 muszą spełniać pierwsze równanie układu (150). Podstawiając je otrzymujemy wyrażenie na θ_1:

$$\sin(2\theta_3)\cos(\theta_1)\alpha_{22} = 0, \tag{158}$$

co daje wartość $\theta_1 = \frac{\pi}{2}$ lub $\theta_1 = \frac{3}{2}\pi$ wynikającą z wartości jakie może przyjmować kąt θ_1 w funkcjach Wignera [49]. Wystarczy wybrać tylko jedną z otrzymanych wartości θ_1.

Zatem transformacja (148) pomiędzy układami (146, 147) ma postać:

$$\begin{aligned}\bar{\alpha}_{20} &= -2\beta_2\cos(\gamma),\\ \bar{\alpha}_{2\pm2} &= 0,\\ \bar{\alpha}_{21} &= -\beta_2\tfrac{1}{\sqrt{2}}\sin(2\theta_3)\sin(\gamma),\\ \bar{\alpha}_{2-1} &= -\bar{\alpha}_{21},\end{aligned} \tag{159}$$

gdzie $\beta_2^2 = \alpha_{20}^2 + 2\alpha_{22}^2$, $\gamma \in \left[\frac{4}{3}\pi, \frac{5}{3}\pi\right]$ oraz $\theta_1 = \theta_2 = \frac{\pi}{2}$, $\cos(2\theta_3) = -\sqrt{3}\,\mathrm{ctg}(\gamma)$.

Z jedynki trygonometrycznej otrzymujemy dwie funkcje opisujące $\sin(2\theta_3)$:

$$\sin(2\theta_3) = \pm\sqrt{1 - 3\,\mathrm{ctg}^2\gamma}. \tag{160}$$

Przyjmijmy, że $\sin(2\theta_3) = \sqrt{1 - 3\,\mathrm{ctg}^2(\gamma)}$.

Wówczas $\alpha'_{21} = -\beta_2\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{1 - 3\,\mathrm{ctg}^2(\gamma)}\sin(\gamma)$.

[1] Dwa punkty $x, x' \in A$ nazywamy równoważnymi względem działania grupy G na A, jeśli $x' = gx$ dla pewnego $g \in G$. Relacja równoważności rozkładająca zbiór A na klasy równoważności. Klasy te nazywamy G-orbitami i oznaczamy $\mathrm{orb}_G(x) = \{gx : g \in G\}$, [58].

Dodatkowo transformacja pomiędzy układami powinna przekształcić wybrany fragment płaszczyzny (β_2, γ) otrzymanej z orbity grupy $\overline{O}_h$ w jeden z równoważnych przedziałów opisujących zmienne $\bar{\alpha}_{20}$ i $\bar{\alpha}_{21}$ wyznaczony przez orbitę otrzymaną dla grupy symetryzacji $\overline{G}_s = \overline{D}_4$ układu 2.

Dla uproszczenia rachunków w układzie $\{\bar{\alpha}_{20}, \bar{\alpha}_{21} = -\bar{\alpha}_{2-1}, \bar{\alpha}_{2\pm 2} = 0\}_f$ wprowadźmy zmienne biegunowe opisujące $\bar{\alpha}_{20}$ i $\bar{\alpha}_{21}$:

$$\bar{\alpha}_{20} = \beta_2 \cos(\psi), \tag{161}$$

$$\bar{\alpha}_{21} = \beta_2 \frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\psi), \tag{162}$$

gdzie $\beta_2 = \bar{\alpha}_{20}^2 + 2\bar{\alpha}_{21}^2 = \alpha_{20}^2 + 2\alpha_{22}^2$.

Dla powyższej parametryzacji otrzymujemy orbitę dla $\overline{D}_4$ w postaci:

$$\mathrm{orb}_{\overline{D}_4}(\psi) = \{\psi, -\psi\}, \tag{163}$$

co daje następujące równoważne przedziały dla kąta ψ: $[k\pi, (k+1)\pi]$, $k = 0, 1$.

Wówczas z (159) otrzymujemy:

$$\cos(\psi) = -2\cos(\gamma), \tag{164}$$

$$\sin(\psi) = -\sin(\gamma)\sqrt{1 - 3\,\mathrm{ctg}^2(\gamma)}. \tag{165}$$

Dzieląc równości z (159) stronami otrzymujemy związek pomiędzy kątami γ i ψ:

$$\mathrm{tg}(\psi) = \frac{1}{2}\sqrt{1 - 3\,\mathrm{ctg}^2(\gamma)}\,\mathrm{tg}(\gamma). \tag{166}$$

W wybranym przedziale $\gamma \in \left[\frac{4}{3}\pi, \frac{5}{3}\pi\right]$ powyższa funkcja jest bijekcją. Oznacza to jednoznaczne przyporządkowanie wartości kątów γ i ψ.

Na podstawie wartości otrzymanych dla funkcji $\sin\psi$ i $\cos\psi$, (164,165), dla wybranego przedziału kąta γ możemy określić, że przedział do którego należy kąt ψ jest następujący $\psi \in [0, \pi]$. Odpowiada on jednemu z przedziałów otrzymanych z $\mathrm{orb}_{\overline{D}_4}(\psi)$.

Zatem transformacja (159) jest bijekcją oraz przekształca wszystkie możliwe kształty otrzymane w układzie 1 na wszystkie możliwe kształty w układzie 2.

4.2 Czy można opisać powierzchnię jądrową tylko przez $\mathrm{Re}(\alpha_{\lambda\mu})$?

W tej części przedstawiona jest analiza dwóch opisów powierzchni jądrowej wykorzystującej zmienne kwadrupolowe oraz oktupolowe. W obu przypadkach układ wewnętrzny jest identyczny i określony jest przez standardowe warunki $\alpha_{22} = \alpha_{2-2}$, $\alpha_{2\pm 1} = 0$.

W jednym z opisów $\{\alpha_{3\mu}\}$ przyjmują wszystkie wartości zespolone, czyli otrzymujemy równanie opisujące dowolną kwadrupolowo-oktupolową powierzchnię zamkniętą. Zadajemy pytanie, czy można używać tylko rzeczywistych zmiennych $\mathrm{Re}(\alpha_{\lambda\mu})$ zamiast zespolonych? Pytanie to jest o tyle zasadne, że z fizycznego punktu widzenia w opisie powierzchni przez $\alpha_{\lambda\mu}$ interesuje nas jej kształt, a nie jej orientacja reprezentowana przez kąty Eulera. Dodatkowo w praktyce, w obliczeniach mikroskopowych znaczna część używanych programów wykorzystuje tylko rzeczywiste wartości zmiennych $\alpha_{\lambda\mu}$. Zatem, czy ograniczenie się jedynie do rzeczywistych zmiennych oktupolowych pozwala otrzymać wszystkie kształty powierzchni jądrowej opisanej przez pełny zakres zmiennych oktupolowych?

Rozważmy zatem następujące dwie powierzchnie jądrowe określone przez różne zbiory zmiennych oktupolowych:

(Z) zespolone zmienne kolektywne $\alpha_{3\mu}$, gdzie $\mu = 0, \pm1, \pm2, \pm3$ oraz równanie powierzchni:

$$\begin{aligned} R(\theta,\varphi) &= R_0[1 + \alpha_{20}Y_{20}(\theta,\varphi) + \alpha_{22}(Y_{22}(\theta,\varphi) + Y_{2,-2}(\theta,\varphi)) \\ &+ \sum_{\nu=-3}^{3} \alpha_{3\nu}^{*} Y_{3\nu}(\theta,\varphi)], \end{aligned} \tag{167}$$

(R) rzeczywiste zmienne kolektywne $\tilde{\alpha}_{3\mu}$, $\mu = 0, 1, 2, 3$ otrzymane z warunków $\tilde{\alpha}_{31} = -\tilde{\alpha}_{3-1}$, $\tilde{\alpha}_{32} = \tilde{\alpha}_{3-2}$, $\tilde{\alpha}_{33} = -\tilde{\alpha}_{3-3}$ oraz odpowiednio równanie powierzchni:

$$\begin{aligned} R(\theta,\varphi) &= R_0[1 + \tilde{\alpha}_{20}Y_{20}(\theta,\varphi) + \tilde{\alpha}_{22}(Y_{22}(\theta,\varphi) + Y_{2,-2}(\theta,\varphi)) \\ &+ \tilde{\alpha}_{30}Y_{30}(\theta,\varphi) + \tilde{\alpha}_{31}(Y_{31}(\theta,\varphi) - Y_{3,-1}(\theta,\varphi)) \\ &+ \tilde{\alpha}_{32}(Y_{32}(\theta,\varphi) + Y_{3,-2}(\theta,\varphi)) \\ &+ \tilde{\alpha}_{33}(Y_{33}(\theta,\varphi) - Y_{3,-3}(\theta,\varphi))]. \end{aligned} \tag{168}$$

Zgodnie z postawionym wcześniej pytaniem, chcemy wiedzieć, czy oba równania opisują ten sam zbiór powierzchni.

Jedynymi transformacjami zachowującymi kształt oraz objętość powierzchni jądrowej są translacje oraz transformacje ortogonalne.

Ponieważ interesują nas jedynie takie przekształcenia, które zachowują warunki określające układ wewnętrzny $\{\alpha_{20},\, \alpha_{22} = \alpha_{2-2},\, \alpha_{2\pm1} = 0\}_{f^{(2)}}$, zatem musimy ograniczyć się jedynie do grupy oktaedralnej $\overline{O}_h$, (podrozdział 3.1).

Dowolna transformacja obrotu powierzchni (167) przeprowadzająca ją do postaci (168) opisanej przez zmienne $\tilde{\alpha}_{3\nu}$ określona jest przez układ równań:

$$\begin{aligned} &\tilde{\alpha}_{2\nu'} = \alpha_{22}\Big(D^{2\,*}_{\nu'2}(g) + D^{2\,*}_{\nu'-2}(g)\Big) + \alpha_{20}D^{2\,*}_{\nu'0}(g), \\ &\qquad\qquad \nu' = 0, \pm 1, \pm 2, \\ &\tilde{\alpha}_{3\mu'} = \textstyle\sum_{\mu=-3}^{3} \alpha_{3\mu} D^{3\,*}_{\mu'\mu}(g),\ \mu' = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \end{aligned} \tag{169}$$

gdzie spełnione są warunki $\tilde{\alpha}_{22} = \tilde{\alpha}_{2-2}$, $\tilde{\alpha}_{2\pm1} = 0$, $\tilde{\alpha}_{31} = -\tilde{\alpha}_{3-1}$, $\tilde{\alpha}_{32} = \tilde{\alpha}_{3-2}$, $\tilde{\alpha}_{33} = -\tilde{\alpha}_{3-3}$.

Ze względu na to, że operacja inwersji przestrzennej, która komutuje z obrotami, jedynie zmienia znak stojący przy $\tilde{\alpha}_{3\mu'}$, dalsze rozważania można ograniczyć do podgrupy $\overline{O}$.

Okazuje się, że istnieją trzy podzbiory powierzchni (167) oraz trzy odpowiadające im podzbiory obrotów, które przeprowadzają (167) w (168):

(i) Pierwszy podzbiór powierzchni (167) określony jest przez zawężenie zmiennych zespolonych przez warunki $\alpha''_{31} = \alpha''_{32} = \alpha''_{33} = 0$[2]:

$$\begin{aligned} R(\theta,\varphi) &= R_0[1 + \alpha_{20}Y_{20}(\theta,\varphi) + \alpha_{22}(Y_{22}(\theta,\varphi) + Y_{2,-2}(\theta,\varphi)) \\ &+ \alpha_{30}Y_{30}(\theta,\varphi) + \alpha_{31}(Y_{31}(\theta,\varphi) - Y_{3,-1}(\theta,\varphi)) \\ &+ \alpha_{32}(Y_{32}(\theta,\varphi) + Y_{3,-2}(\theta,\varphi)) + \alpha_{33}(Y_{33}(\theta,\varphi) - Y_{3,-3}(\theta,\varphi))]. \end{aligned} \tag{170}$$

W tym przypadku obroty przeprowadzające (167) w (168) tworzą grupę $\overline{D}_{4;y} = \{E, C_{2x}, C_{2y}, C_{2z}, C_{4y}, C_{4y}^{-1}, C_{2c}, C_{2d}\}$, która jest równocześnie grupą symetryzacji odpowiadającego modelu kolektywnego. Grupą symetrii tej powierzchni jest grupa $C_{s;y}$, której osią symetrii jest oś OY. Elementy tej grupy przedstawione są w dodatku A.3.

(ii) Drugi podzbiór dany jest przez związki $\alpha'_{31} = \alpha''_{32} = \alpha'_{33} = 0$:

$$\begin{aligned} R(\theta,\varphi) &= R_0[1 + \alpha_{20}Y_{20}(\theta,\varphi) + \alpha_{22}(Y_{22}(\theta,\varphi) + Y_{2,-2}(\theta,\varphi)) \\ &+ \alpha_{30}Y_{30}(\theta,\varphi) + \alpha_{31}(Y_{31}(\theta,\varphi) + Y_{3,-1}(\theta,\varphi)) \\ &+ \alpha_{32}(Y_{32}(\theta,\varphi) + Y_{3,-2}(\theta,\varphi) + \alpha_{33}(Y_{33}(\theta,\varphi) + Y_{3,-3}(\theta,\varphi)]. \end{aligned} \tag{171}$$

[2] $\alpha'_{\lambda\mu} = \frac{1}{2}(\alpha_{\lambda\mu} + \alpha^*_{\lambda\mu})$, $\alpha''_{\lambda\mu} = -\frac{i}{2}(\alpha_{\lambda\mu} - \alpha^*_{\lambda\mu})$.

Grupą symetryzacji zmiennych opisujących (171) jest $\overline{D}_{4;x} = \{E, C_{2x}, C_{2y}, C_{2z}, C_{4x}, C_{4x}^{-1}, C_{2e}, C_{2f}\}$. Można ją otrzymać obracając grupę $\overline{D}_{4;y}$ o kąt $-\frac{\pi}{2}$ względem osi OZ, tj. $\overline{D}_{4;x} = \mathcal{R}_z(-\frac{\pi}{2})\overline{D}_{4;y}\mathcal{R}_z(\frac{\pi}{2})$.

W przypadku powierzchni (171) obroty $C_{3\alpha}^{-1}, C_{3\beta}^{-1}, C_{3\gamma}^{-1}, C_{3\delta}^{-1}, C_{4z}, C_{4z}^{-1}, C_{2a}, C_{2b}$ pozwalają otrzymać powierzchnię opisaną zmiennymi rzeczywistymi (168). Otrzymane obroty nie tworzą grupy. Grupą symetrii tej powierzchni jest grupa $C_{s;x}$, której osią symetrii jest oś OX.

(iii) Trzeci zbiór warunków $\alpha_{30} = \alpha_{32}'' = \alpha_{32}' = 0$ opisuje powierzchnię jądrową:

$$\begin{aligned} R(\theta,\varphi) &= R_0[1 + \alpha_{20}Y_{20}(\theta,\varphi) + \alpha_{22}(Y_{22}(\theta,\varphi) + Y_{2,-2}(\theta,\varphi)) \\ &+ \alpha_{31}^*Y_{31}(\theta,\varphi) + \alpha_{3-1}^*Y_{3,-1}(\theta,\varphi) + \alpha_{33}^*Y_{33}(\theta,\varphi) \\ &+ \alpha_{3-3}^*Y_{3,-3}(\theta,\varphi)], \end{aligned} \tag{172}$$

której grupą symetryzacji jest $\overline{D}_{4;z} = \{E, C_{2x}, C_{2y}, C_{2z}, C_{4z}, C_{4z}^{-1}, C_{2a}, C_{2b}\}$. Podobnie jak poprzednio grupę tę można otrzymać z grupy $\overline{D}_{4;y}$ obracając ją o kąt $-\frac{\pi}{2}$ względem osi OX, tj. $\overline{D}_{4;z} = \mathcal{R}_x(-\frac{\pi}{2})\overline{D}_{4;y}\mathcal{R}_x(\frac{\pi}{2})$.

Jak i poprzednio, w tym przypadku obroty transformujące (172) do (168) nie tworzą żadnej grupy. Są nimi $C_{3\alpha}, C_{3\beta}, C_{3\gamma}, C_{3\delta}, C_{4x}, C_{4x}^{-1}, C_{2e}, C_{2f}$. Grupą symetrii tej powierzchni jest grupa $C_{s;z}$, której osią symetrii jest oś OZ.

We wszystkich trzech przypadkach można zauważyć, że zmienna α_{32}'' musi być równa zero. Zmienna ta jest niezmiennikiem grupy tetraedralnej $\overline{T}_d$ o osiach czterokrotnych OX, OY, OZ. Ze względu na to, że w równaniach opisujących powierzchnie (170,171,172) $\alpha_{32}'' = 0$, zatem nie jest możliwe otrzymanie powierzchni (168) z powierzchni (167) o wyżej wspomnianej symetrii tetraedralnej $\overline{T}_d$.

Dodatkowo widać, że każda z otrzymanych powierzchni posiada inną oś symetrii.

Z powyższych rozważań wynika, że ograniczenie się tylko do zmiennych $\mathrm{Re}(\alpha_{\lambda\mu})$, $\lambda = 2, 3$ prowadzi do zawężenia pełnego modelu kolektywnego.

4.2.1 Jakobian transformacji pomiędzy uładem laboratoryjnym a wewnętrznym

Podczas rozważań transformacji pomiędzy układem laboratoryjnym a wewnętrznym istotną informacją jest również postać jakobianu tego przekształcenia. W przypadku, gdy wartość jakobianu jest różna od zera w danym

punkcie, wówczas można znaleźć przekształcenie odwrotne pomiędzy układami współrzędnych w otoczeniu tego punktu rozmaitości kolektywnej, [59].

W przypadku, gdy mamy jedynie zmienne kwadrupolowe, wówczas dla standardowego przekształcenia do układu wewnętrznego otrzymujemy niezerowy jakobian wyliczony np. w [62]. W naszym przypadku, zgodnie z definicją transformacji pomiędzy układami (wzór (118)):

$$\alpha_{2\mu}^{lab} = D_{\mu 0}^{2}(\Omega_1,\Omega_2,\Omega_3)^*\alpha_{20} + \left[D_{\mu -2}^{2}(\Omega_1,\Omega_2,\Omega_3)^* + D_{\mu 2}^{2}(\Omega_1,\Omega_2,\Omega_3)^*\right]\alpha_{22},$$
$$\alpha_{2\pm 1} = 0,\ \alpha_{22} = \alpha_{2-2} \tag{173}$$

otrzymujemy następującą wartość jakobianu przejścia:

$$\frac{\partial(\alpha_{2-2}^{lab},\alpha_{2-1}^{lab},\alpha_{20}^{lab},\alpha_{21}^{lab},\alpha_{22}^{lab})}{\partial(\alpha_{20},\alpha_{22},\Omega_1,\Omega_2,\Omega_3)} = 4\alpha_{22}\big(2\alpha_{22}^2 - 3\alpha_{20}^2\big)\sin(\Omega_2). \tag{174}$$

Zatem transformacja z układu laboratoryjnego do wewnętrznego jest możliwa, gdy $\alpha_{22} \neq 0$, $\alpha_{20}^2 \neq \frac{2}{3}\alpha_{22}^2$ oraz $\Omega_2 \neq 0, \pi$.

Przypuśćmy następnie, że rozważamy model, w którym jedynymi zmiennymi są zmienne oktupolowe [62, 63, 64, 65, 66, 67]. Z podanych przykładów parametryzowania zmiennych oktupolowych najbardziej interesuje nas ograniczenie się do wartości rzeczywistych $\{\tilde{\alpha}_{30}, \tilde{\alpha}_{3-1} = -\tilde{\alpha}_{31}, \tilde{\alpha}_{3-2} = \tilde{\alpha}_{32}, \tilde{\alpha}_{3-3} = -\tilde{\alpha}_{33}\}_f$. Jednakże, jak pokazano w pracy [62], w tym przypadku jakobian przekształcenia zeruje się dla wszystkich wartości zmiennych kolektywnych, co oznacza, że warunki $\{\tilde{\alpha}_{30}, \tilde{\alpha}_{3-1} = -\tilde{\alpha}_{31}, \tilde{\alpha}_{3-2} = \tilde{\alpha}_{32}, \tilde{\alpha}_{3-3} = -\tilde{\alpha}_{33}\}_f$ nie definiują układu wewnętrznego.

Korzystając z naszej definicji układu wewnętrznego:

$$\begin{aligned}\alpha_{3\mu}^{lab} = D_{\mu 0}^{3}(\Omega_1,\Omega_2,\Omega_3)^*\tilde{\alpha}_{30} &+ \left[D_{\mu 1}^{3}(\Omega_1,\Omega_2,\Omega_3)^* - D_{\mu -1}^{3}(\Omega_1,\Omega_2,\Omega_3)^*\right]\tilde{\alpha}'_{31} \\ &+ \left[D_{\mu 2}^{3}(\Omega_1,\Omega_2,\Omega_3)^* + D_{\mu -2}^{3}(\Omega_1,\Omega_2,\Omega_3)^*\right]\tilde{\alpha}'_{32} \\ &+ \left[D_{\mu 3}^{3}(\Omega_1,\Omega_2,\Omega_3)^* - D_{\mu -3}^{3}(\Omega_1,\Omega_2,\Omega_3)^*\right]\tilde{\alpha}'_{33}.\end{aligned} \tag{175}$$

otrzymana wartość jakobianu $\frac{\partial(\alpha_{30}^{lab},\alpha_{31}^{\prime lab},\alpha_{32}^{\prime lab},\alpha_{33}^{\prime lab},\alpha_{31}^{\prime\prime lab},\alpha_{32}^{\prime\prime lab},\alpha_{33}^{\prime\prime lab})}{\partial(\tilde{\alpha}_{30},\tilde{\alpha}'_{31},\tilde{\alpha}'_{32},\tilde{\alpha}'_{33},\Omega_1,\Omega_2,\Omega_3)} = 0$ i jest identyczna jak wynik uzyskany w [62], gdzie $\alpha_{3\mu}^{\prime lab}$ i $\alpha_{3\mu}^{\prime\prime lab}$ oznaczają odpowiednio część rzeczywistą i urojoną dla $\alpha_{3\mu}^{lab}$, $\mu = 1, 2, 3$. Dokładny wzór dla tych funkcji przedstawiony jest poniżej we wzorze (176).

Przykład parametryzacji zmiennych oktupolowych, dla których jakobian przejścia ma wartość różną od zera został podany np. w [67].

Trzeba jednak pamiętać, że rozważany przypadek zachodzi, gdy w modelu mamy jedynie zmienne oktupolowe. Nie jest on jednak równoważny sytuacji, gdy oprócz zmiennych oktupolowych mamy jeszcze kwadrupole.

Gdy definiujemy układ wewnętrzny poprzez warunki $\{\alpha_{20}, \alpha_{2\pm1} = 0, \alpha_{22} = \alpha_{2-1},\ \alpha_{30}, \alpha_{3\pm1}, \alpha_{3\pm2}, \alpha_{3\pm3}\}_f$, tzn. gdy zmienne oktupolowe tworzą pełny tensor o wartościach zespolonych (Z), gdzie kąty Eulera są zdefiniowane jednoznacznie przez zmienne kwadrupolowe, jakobian przekształcenia jest równy jakobianowi (174) i nie jest zależny od żadnych zmiennych oktupolowych, [62].

Ponieważ w naszym przypadku, jako drugi model, rozważamy przestrzeń kwadrupolowo-oktupolową ograniczoną do zmiennych rzeczywistych (R), zatem należy policzyć jakobian dla tak wybranej podprzestrzeni zmiennych kolektywnych. Zgodnie z przyjętą definicją transformacji pomiędzy układem laboratoryjnym a wewnętrznym, wzór (118), kąty Eulera określające położenie układu wewnętrznego względem laboratoryjnego są identyczne zarówno dla zmiennych kwadrupolowych jak i oktupolowych. Jednak samo określenie kątów Ω zależy jedynie od trzech warunków definiujących układ wewnętrzny, co w naszym przypadku odpowiada równościom $\alpha_{2\pm1} = 0, \alpha_{22} = \alpha_{2-2}$. Dodatkowe warunki zawężające zakres zmiennych oktupolowych do części rzeczywistych $\mathrm{Re}(\alpha_{3\mu})$ odpowiadają sytuacji, gdy liczba funkcj $f_k(\alpha_{\lambda\mu}, \Omega)$ jest większa od wymaganych trzech, podrozdział 3.1, co pociąga za sobą zmianę struktury rozmaitości zmiennych kolektywnych. Zwiększenie liczby nałożonych warunków na zmienne wewnętrzne powoduje ograniczenie przestrzeni zmiennych laboratoryjnych do pewnej podprzestrzeni.

W dalszych rozważaniach, aby to pokazać, wygodniej jest osobno rozważać części rzeczywiste: α_{30}^{lab}, $\alpha_{3\mu}^{\prime lab}$, $\mu = 1, 2, 3$ i urojone: $\alpha_{3\mu}^{\prime\prime lab}$ laboratoryjnych zmiennych oktupolowych:

$$
\begin{gathered}
\alpha_{3\mu}^{\prime lab} = \tilde{\alpha}_{30} d^3_{\mu 0}(\Omega_2)\cos(\mu\Omega_1) \\
+\tilde{\alpha}_{31}\Big(d^3_{\mu 1}(\Omega_2)\cos(\mu\Omega_1+\Omega_3) - d^3_{\mu -1}(\Omega_2)\cos(\mu\Omega_1-\Omega_3)\Big) \\
+\tilde{\alpha}_{32}\Big(d^3_{\mu 2}(\Omega_2)\cos(\mu\Omega_1+2\Omega_3) + d^3_{\mu -2}(\Omega_2)\cos(\mu\Omega_1-2\Omega_3)\Big) \\
+\tilde{\alpha}_{33}\Big(d^3_{\mu 3}(\Omega_2)\cos(\mu\Omega_1+3\Omega_3) - d^3_{\mu -3}(\Omega_2)\cos(\mu\Omega_1-3\Omega_3)\Big), \\
\alpha_{3\mu}^{\prime\prime lab} = \tilde{\alpha}_{30} d^3_{\nu 0}(\Omega_2)\cos(\mu\Omega_1) \\
+\tilde{\alpha}_{31}\Big(d^3_{\nu 1}(\Omega_2)\sin(\nu\Omega_1+\Omega_3) - d^3_{\nu -1}(\Omega_2)\sin(\nu\Omega_1-\Omega_3)\Big) \\
+\tilde{\alpha}_{32}\Big(d^3_{\nu 2}(\Omega_2)\sin(\nu\Omega_1+2\Omega_3) + d^3_{\nu -2}(\Omega_2)\sin(\nu\Omega_1-2\Omega_3)\Big) \\
+\tilde{\alpha}_{33}\Big(d^3_{\nu 3}(\Omega_2)\sin(\nu\Omega_1+3\Omega_3) - d^3_{\nu -3}(\Omega_2)\sin(\nu\Omega_1-3\Omega_3)\Big), \\
\mu = 0,1,2,3, \quad \nu = 1,2,3, \qquad (176)
\end{gathered}
$$

oraz $\alpha_{30}^{\prime lab} = \alpha_{30}^{lab}$. Funkcja $d^3_{\nu\nu'}(\Omega_2)$ występująca w (176) jest rzeczywistą funk-

cją wchodzącą w skład funkcji Wignera $D^3_{\nu\nu'}(\Omega_1,\Omega_2,\Omega_3) = e^{-i\nu\Omega_1} d^3_{\nu\nu'}(\Omega_2) e^{-i\nu\Omega_3}$ [49].

Jak było wcześniej wspomniane układ wewnętrzny otrzymywany jest z trzech warunków nałożonych na zmienne kwadrupolowe, dlatego też w układzie laboratoryjnym mamy pełną przestrzeń w zmiennych kwadrupolowych $\alpha^{lab}_{2\mu}$, $\mu = 0, \pm1, \pm2$. W układzie wewnętrznym odpowiadają im rzeczywiste zmienne α_{20} i α_{22} oraz trzy kąty Eulera $\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3$. Dodatkowo mamy ograniczenie przestrzeni oktupolowej do czterech wymiarów opisanych przez zmienne rzeczywiste $\tilde{\alpha}_{30}, \tilde{\alpha}_{31}, \tilde{\alpha}_{32}, \tilde{\alpha}_{33}$. Oznacza to, że chcąc zachować identyczny wymiar w układzie laboratoryjnym i wewnętrznym, laboratoryjna przestrzeń oktupolowa również musi posiadać cztery wymiary. Problem polega na znalezieniu czterech niezależnych zmiennych oktupolowych w układzie laboratoryjnym, tak aby jakobian przejścia miał wartość różną od zera [60], [61]. Z (176) widać, że każda oktupolowa zmienna laboratoryjna zależy od siedniu zmiennych wewnętrznych $\tilde{\alpha}_{30}, \tilde{\alpha}_{31}, \tilde{\alpha}_{32}, \tilde{\alpha}_{33}, \Omega_1, \Omega_2, \Omega_3$, gdzie kąty Ω zdefiniowane są z warunków nałożonych na zmienne kwadrupolowe. Chcąc znaleźć cztery niezależne laboratoryjne zmienne oktupolowe trzeba policzyć jakobiany rzędu 4 dla czterech wybranych $\alpha^{lab}_{30}, \alpha'^{lab}_{3\mu}, \alpha''^{lab}_{3\mu}$, $\mu = 1, 2, 3$ i wybrać ten, który przyjmuje wartości różne od zera. Dla naszego przypadku został obliczony następujący jakobian:

$$\frac{\partial(\alpha^{lab}_{30}, \alpha'^{\,lab}_{31}, \alpha'^{\,lab}_{32}, \alpha'^{\,lab}_{33})}{\partial(\tilde{\alpha}_{30}, \tilde{\alpha}_{31}, \tilde{\alpha}_{32}, \tilde{\alpha}_{33})}, \tag{177}$$

który jest funkcją zależną od kątów Eulera (kąty Eulera są tu tylko parametrami), przyjmującą wartości zerowe dla poszczególnych przypadków, na przykład dla $(\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3) = \{(\frac{\pi}{2}, \Omega_2, 0), (\frac{\pi}{2}, \Omega_2, \pi), (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \Omega_3)\}$.

Korzystając z (173) i (176) wartość jakobianu przejścia dla omawianej przestrzeni kwadrupolowo-oktupolowej

$$\frac{\partial(\alpha^{lab}_{2-2}, \alpha^{lab}_{2-1}, \alpha^{lab}_{20}, \alpha^{lab}_{21}, \alpha^{lab}_{22}, \alpha^{lab}_{30}, \alpha'^{\,lab}_{31}, \alpha'^{\,lab}_{32}, \alpha'^{\,lab}_{33})}{\partial(\alpha_{20}, \alpha_{22}, \Omega_1, \Omega_2, \Omega_3, \tilde{\alpha}_{30}, \tilde{\alpha}_{31}, \tilde{\alpha}_{32}, \tilde{\alpha}_{33})}, \tag{178}$$

można ogólnie zapisać jako

$$\alpha_{22}\big(2\alpha^2_{22} - 3\alpha^2_{20}\big) f(\Omega), \tag{179}$$

gdzie $f(\Omega)$ jest funkcją zbudowaną z funcji trygonometrycznych zależnych od kątów Eulera. Otrzymany jakobian jest niezależny od wewnętrznych zmiennych oktupolowych, co oznacza, że istnieje transformacja pomiędzy układami dla dowolnych wartości zmiennych oktupolowych.

Zatem przy przekształceniu pomiędzy układami, gdzie układ wewnętrzny określony jest przez warunki nałożone na kwadrupole $\{\alpha_{2\mu}\}$, a oktupole

$\{\alpha_{3\nu}\}$ ograniczone są do części rzeczywistych otrzymujemy, że niezależnymi laboratoryjnymi zmiennymi oktupolowymi $\{\alpha_{3\nu}^{lab}\}$ są w naszym przypadku $\alpha_{30}^{lab}, \alpha_{31}'^{\,lab}, \alpha_{32}'^{\,lab}, \alpha_{33}'^{\,lab}$, natomiast części urojone $\alpha_{31}''^{lab}, \alpha_{32}''^{lab}, \alpha_{33}''^{lab}$ mogą być przedstawione za pomocą funkcji zmiennych $\alpha_{30}^{lab}, \alpha_{31}'^{\,lab}, \alpha_{32}'^{\,lab}, \alpha_{33}'^{\,lab}$ i trzech kątów Eulera Ω. Oznacza to, że zmienne $\alpha_{3\mu}''^{lab}$ nie są niezależne w układzie laboratoryjnym, a ich wartości zależą od położenia układu wewnętrznego względem laboratoryjnego oraz pozostałych oktupolowych zmiennych laboratoryjnych. W takiej kwadrupolowo-oktupolowej przestrzeni postacie dopuszczalnych kształtów jądrowych są określone wzorem:

$$R^{lab}(\theta^{lab}, \phi^{lab}) = R_0 \Big[1 + \textstyle\sum_{\mu=-2}^{2} \alpha_{2\mu}^{lab\,*} Y_{2\mu}(\theta^{lab}, \phi^{lab})$$
$$+ \textstyle\sum_{\nu=-3}^{3} \big((\alpha_{3\nu}'^{\,lab}(\Omega))^* + i(\alpha_{3\nu}''^{lab}(\Omega, \{(\alpha_{3\nu}'^{\,lab})^*\}))^*\big) Y_{3\nu}(\theta^{lab}, \phi^{lab})\Big] . \quad (180)$$

5 Hipoteza istnienia jąder o wyższych symetriach punktowych

W tym rozdziale zadajemy sobie pytanie czy istnieją jądra o wyższej symetrii punktowej, czyli różnej od sferycznej ($SO(3)$), osiowej ($SO(2),\ D_\infty$) oraz elipsoidalnej (trójosiowej) ($D_2,\ D_{2h}$) [3, 4]. Zgodnie z teorią grup symetrii degeneracja widma energetycznego jądra opisanego danym hamiltonianem jest ściśle powiązana (o ile nie występuje tak zwana degeneracja przypadkowa) z wymiarem reprezentacji jego grupy symetrii. Dokładniej mówiąc degeneracja jest na ogół (zależy to od zachowania się reprezentacji względem transformacji odwrócenia w czasie) równa wymiarowi odpowiedniej nieprzywiedlnej reprezentacji. Oznacza to także, że symetrie posiadające więcej wymiarowe reprezentacje mogą prowadzić do zwiększenia odległości pomiędzy stanami energetycznymi (grupowanie się stanów związane z degeneracją), co z kolei może prowadzić do powstania większych przerw energetycznych.

Znając symetrię G hamiltonianu jądrowego można znaleźć, niezależnie od szczegółów modelu, reguły wyboru ([1]) dla przejść elektromagnetycznych. Przyjmujemy, że stan początkowy $|\nu\Gamma a\rangle$ transformuje się względem grupy symetrii G przy pomocy nieprzywiedlnej reprezentacji Γ. Tu ν oznacza dodatkowe liczby kwantowe opisujące stan, a a numeruje wektory należące do bazy reprezentacji Γ. Podobnie oznaczamy stan końcowy $|\nu'\Gamma'a'\rangle$, a operator przejścia $Q^{\widetilde{\Gamma}}$ niech będzie nieprzywiedlnym tensorem względem grupy symetrii G:

$$\mathcal{R}(g) Q_b^{\widetilde{\Gamma}} \mathcal{R}^{-1}(g) = \sum_{b'} \Delta_{b'b}^{\widetilde{\Gamma}}(g) Q_{b'}^{\widetilde{\Gamma}}, \quad (181)$$

gdzie $\Delta^{\widetilde{\Gamma}}(g)$ oznacza macierz dla elementu g w nieprzywiedlnej reprezentacji

$\widetilde{\Gamma}$ do której należy $Q^{\widetilde{\Gamma}}$, $\mathcal{R}(g)$ odpowiada obrotowi o kąt $g \in G$. Elementy macierzowe $\langle \nu'\Gamma' a' | Q^{\widetilde{\Gamma}} | \nu \Gamma a \rangle$ mogą mieć wartości różne od 0 wtedy, gdy iloczyn Kroneckera reprezentacji stanu początkowego i operatora można rozłożyć na sumę reprezentacji, która zawiera tę do której należy stan końcowy. Oznacza to, że musi zachodzić:

$$\Gamma \times \widetilde{\Gamma} \supset \Gamma'. \tag{182}$$

W przeciwnym wypadku wiadomo, że taki element macierzowy będzie miał wartość równą zero, czyli otrzymujemy przejścia wzbronione.

Dokładniejszy opis otrzymywania reguł wyboru oraz potrzebne definicje i twierdzenia przedstawione są w podrozdziale 6.3.

Zarówno możliwość pojawienia się większych przerw energetycznych jak i reguł wyboru dla przejść elektromagnetycznych została wykorzystana do badania jąder podejrzewanych o posiadanie wyższych symetrii punktowych. Hipotezę tę analizowano dla szeregu jąder atomowych takich jak gadolin czy dysproz. Do ich opisu wykorzystano grupy: tetraedralną oraz oktaedralną, za pomocą których skonstruowano stany, dzięki którym próbowano odtworzyć wyniki eksperymentalne.

W badanych modelach udało się znaleźć liczby magiczne inne niż dla jąder mających mniejszą symetrię, niestety grupy tetraedralna i oktaedralna nie pokazują bardzo charakterystycznych, możliwych do wykorzystania w eksperymentach reguł wyboru. Zatem na podstawie otrzymanych wyników pomiaru trudno jest powiedzieć czy dane jądro atomowe posiada symetrię tetraedralną (oktaedralną).

Badania były przeprowadzone w ramach modelu średniego pola, gdzie wprowadzając odpowiednie parametry deformacji, modelowano hamiltoniany o różnych symetriach punktowych. Jądra atomowe zostały opisane za pomocą fenomenologicznego hamiltonianu jednocząstkowego z potencjałem Woodsa-Saxona, [52, 53, 54, 55]:

$$V_{WS} = \frac{V_0}{1 + \exp(\mathrm{dist}_\Sigma(\vec{r})/a)}, \tag{183}$$

gdzie powierzchnia jądra Σ przedstawiona jest za pomocą standardowego wzoru:

$$\Sigma: \quad R(\theta, \varphi) = R_0 [1 + \sum_{\lambda=2}^{\infty} \sum_{\nu=-\lambda}^{\lambda} \alpha^*_{\lambda\nu} Y_{\lambda\nu}(\theta, \varphi)]. \tag{184}$$

Użyty potencjał zależy od dwóch parametrów: od głębokości potencjału V_0 oraz rozmycia jego brzegu a. Funkcja $\mathrm{dist}_\Sigma(\vec{r})$ określa odległość punktu wyznaczonego przez wektor $\vec{r}$ od powierzchni jądrowej Σ. Kształt jądra atomowego, w tym opisie, zależy od wartości parametrów deformacji $\alpha_{\lambda\mu}$. Istotne

jest również to, że grupa symetrii potencjału jest równocześnie grupą symetrii geometrycznych powierzchni jądra atomowego. W pracach [3, 4] wykonano obliczenia, w których powierzchnia Σ była opisana przez tetraedralny parametr deformacji $\alpha_{32} = \alpha_{32}^*$:

$$\Sigma: \quad R(\theta, \varphi) = R_0[1 + \alpha_{32}(Y_{32}(\theta, \varphi) + Y_{3-2}(\theta, \varphi))]. \tag{185}$$

Tak otrzymana powierzchnia Σ posiada symetrię opisaną przez grupę T_d^D, [2]. Co było istotne, w tej grupie istnieją dwie dwuwymiarowe reprezentacje oraz jedna czterowymiarowa. Pamiętajmy, że degeneracja określonego poziomu energetycznego zależy od wymiaru reprezentacji nieprzywiedlnej, dla której ta energia została wyznaczona i prowadzi do grupowania się poziomów jednocząstkowych w multiplety względem grupy symetrii. To grupowanie może prowadzić do pojawienia się innych lub dodatkowych liczb magicznych niż zaobserwowane dla jąder sferycznych. W podanych wcześniej artykułach zostały policzone numerycznie protonowe i neutronowe widma jednocząstkowe dla grupy T_d^D. W trakcie tych obliczeń otrzymano duże wartości przerw energetycznych dla następujących liczb protonów, [4]:

$$Z = 16, 20, 32, 40, 56, 58, 70, 90, 94, \tag{186}$$

oraz dla neutronów

$$N = 16, 20, 32, 40, 56, 58, 70, 90, 94, 112. \tag{187}$$

Grupa T_d^D nie jest jedyną grupą posiadającą wielowymiarowe reprezentacje. W dalszych badaniach, [68], wzięto również pod uwagę większą grupę O_h^D, posiadającą cztery dwuwymiarowe reprezentacje i dwie czterowymiarowe. Dla tych dwóch grup skonstruowano niezmienniki powierzchni (184), dla multipolowości $\lambda \leq 9$. Zgodnie z wynikami prac [3, 4] niezmiennikiem grupy T_d^D o najniższej multipolowości $\lambda = 3$ jest sama zmienna $\alpha_{3\pm2} \equiv t_3$. W przypadku grupy O_h^D niezmiennikiem o najniższej multipolowości jest $v = \sqrt{\frac{14}{5}}\alpha_{40} - \alpha_{4-4} - \alpha_{44}$, co daje następujący związek pomiędzy parametrami deformacji: $\alpha_{40} \equiv o_4,\ \alpha_{4\pm4} \equiv -\sqrt{\frac{5}{14}}o_4$. Oznacza to, że powierzchnie jądrowe mające symetrie T_d^D lub O_h^D mają odpowiednio następujące postacie:

$$R(\theta, \varphi) = R_0[1 + t_3(Y_{32}(\theta, \varphi) + Y_{3-2}(\theta, \varphi))] \tag{188}$$

oraz

$$R(\theta, \varphi) = R_0[1 + \sqrt{\frac{5}{14}}o_4(\sqrt{\frac{14}{5}}Y_{40}(\theta, \varphi) - Y_{4-4}(\theta, \varphi) - Y_{44}(\theta, \varphi))]. \tag{189}$$

Ponieważ w prezentowanych wynikach z femenologicznym potencjałem Woodsa-Saxona symetria została narzucona przez dobór odpowiednich parametrów, zostały dodatkowo wykonane obliczenia samozgodne metodą Hartree-Focka. Nie zawierają one bezpośredniej informacji o symetrii powierzchni jądrowej. Celem tych rachunków było obliczenie momentów multipolowych dla jąder ziem rzadkich. Związki pomiędzy składowymi momentów multipolowych zostały przedstawione w tabeli poniżej, [68]:

Z	N	Q_{32}	Q_{40}	Q_{44}	$-\sqrt{\frac{5}{14}}Q_{40}$
64	86	0.94181	−0.22737	0.13587	0.13588
64	90	1.39465	−0.42825	0.25592	0.25592
64	92	0.00000	−0.44721	0.26726	0.26726
62	86	0.48739	−0.08694	0.05195	0.05195
62	88	0.81210	−0.21880	0.13076	0.13076
62	90	1.20601	−0.38033	0.22729	0.22729

(190)

Porównując liczby występujące w kolumnie 5 i 6, widać, że są one zgodne z zależnościami występującymi pomiędzy $\alpha_{40}, \alpha_{4\pm2}$ w niezmienniku v. Sugeruje to powierzchnię jądrową o następującym kształcie:

$$\Sigma: \quad R(\theta,\varphi) = R_0\Big\{1 + t_3(Y_{32}(\theta,\varphi) + Y_{3-2}(\theta,\varphi)) + \\ + \sqrt{\frac{5}{14}}o_4(\sqrt{\frac{14}{5}}Y_{40}(\theta,\varphi) - Y_{4-4}(\theta,\varphi) - Y_{44}(\theta,\varphi)\Big\}. \tag{191}$$

Dodatkowo widać, że dla jąder przedstawionych w tabeli, jednocześnie występują kombinacje symetrii T_d^D i O_h^D. Jedynie dla jądra o liczbie protonów 64 i liczbie neutronów 92, ^{156}Gd, otrzymujemy czystą symetrię O_h^D (ośmiościanu), [2].

Pierwsze modele próbujące oszacować przejścia elektromagnetyczne dla hipotetycznego jądra atomowego opisanego przez grupę T_d zostały przedstawione w artykulach [68, 69]. Przedstawiony w nich model kolektywny opisywał część wibracyjną w rzeczywistych zmiennych kwadrupolowych $\alpha_{2\mu}$, $\mu = 0, 2$ i zespolonych oktupolowych $\alpha_{3\mu}$, $\mu = 0, \pm1, \pm2, \pm3$, co łącznie daje dziewięć zmiennych wibracyjnych. Powierzchnia jądrowa opisana przez taki dobór zmiennych ma postać:

$$R(\theta,\varphi) = R_0[1 + \alpha_{20}Y_{20}(\theta,\varphi) + \alpha_{22}(Y_{22}(\theta,\varphi) + Y_{2,-2}(\theta,\varphi)) + \\ + \sum_{\nu=-3}^{3} \alpha_{3\nu}^{*} Y_{3\nu}(\theta,\varphi)]. \tag{192}$$

Przedstawiony model składa się z sumy niesprzężonych pomocniczych hamiltonianów oscylatora harmonicznego, dla których część wibracyjna dzieli się

na część kwadrupolową $H_{vib;2}$ i oktupolową $H_{vib;3}$:

$$H_{vib;2} = \sum_{\mu=0,2} H^{(r)}_{vib;2\mu}, \quad H_{vib;3} = \sum_{\mu=0}^{3} H^{(r)}_{vib;3\mu} + \sum_{\mu=1}^{3} H^{(i)}_{vib;3\mu}, \tag{193}$$

gdzie

$$H^{(k)}_{vib;\lambda\mu} = -\frac{\hbar}{2B^{(k)}_{\lambda\mu}} \frac{\partial^2}{\partial(\alpha^{(k)}_{\lambda\mu})^2} + \frac{1}{2} B^{(k)}_{\lambda\mu} [\omega^{(k)}_{\lambda\mu}]^2 (\alpha^{(k)}_{\lambda\mu} - (\mathring{\alpha}_{\lambda\mu})^{(k)})^2; \quad k = r, i, \tag{194}$$

a $B^{(k)}$ jest parametrem masowym, $\omega^{(k)}_{\lambda\mu}$ - określa częstość drgań, r- oznacza część rzeczywistą oraz i- część urojoną $\alpha_{3\mu} = \alpha^{(r)}_{3\mu} + i\alpha^{(i)}_{3\mu}$ (co jest równoważne zapisowi używanemu w dalszej części pracy: $\alpha_{3\mu} = \alpha'_{3\mu} + i\alpha''_{3\mu}$). Parametry deformacji statycznych $\mathring{\alpha}^{(k)}_{\lambda\mu}$ określają minima potencjału, a zatem również powierzchni jądrowej wokół której następują drgania. Konstrukcja hamiltonianu posiadającego symetrię T_d została również przedstawiona w [70].

W omawianym modelu rozważany jest mały fragment widma energetycznego, który można schematyczne przedstawić jako:

	________ 9^-
________ 8^+	________ 7^-
________ 6^+	________ 5^-
________ 4^+	________ 3^-
________ 2^+	$\mathring{\alpha}_{20}, \mathring{\alpha}_{22} = 0$
________ 0^+	$\mathring{\alpha}_{32} \neq 0$
$\mathring{\alpha}_{20}, \mathring{\alpha}_{22} \neq 0$	T_d
$\mathring{\alpha}_{3\mu} = 0$	
D_{2h}	

Rysunek 1: Fragment widma energetycznego dla modelu kwadrupolowo-oktupolowego

Pierwsze pasmo, jest rotacyjnym pasmem kwadrupolowym. Ta część stanów posiada deformację tylko w części kwadrupolowej, co odpowiada symetrii elipsoidy trójosiowej D_{2h}. Stany, dla tego pasma, opisane są za pomocą funkcji oscylatora harmonicznego mających zero fononów.

Drugie pasmo jest rotacyjnym pasmem oktupolowym. Jedyną niezerowa deformacją statyczną w tym paśmie jest deformacja tetraedralna, co daje symetrię T_d[3]. Dla tego pasma oktupolowego stany opisane są za pomocą jednofononowych funkcji oscylatora harmonicznego.

[3] W obliczeniach przedstawionych w [68, 69] osie układu wewnętrznego są obrócone

Ogólnie przedstawiona przez autorów metoda otrzymania funkcji jednofononowej o odpowiedniej symetrii składa się z następujących kroków:

(1) Funkcje opisujące część wibracyjną składają się z iloczynu dziewięciu funkcji jednowymiarowego zero lub jednofononowego oscylatora harmonicznego. Każda z funkcji wchodząca w skład iloczynu opisana jest przez jedną ze zmiennych: zmienną kwadrupolową $\alpha_{2\mu}$, $\mu = 0, 2$ i zmienną oktupolową $\alpha_{3\nu}$ $\nu = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$. Zależą one od parametru η_λ, który jest miarą szerokości potencjału odpowiednio w kierunku kwadrupolowym i oktupolowym:

$$\eta_\lambda = \sqrt{\frac{B^{(k)}_{\lambda\mu}\omega^{(k)}_{\lambda\mu}}{\hbar}}, \quad \lambda = 2, 3. \tag{195}$$

Chcąc uzyskać funkcję o odpowiedniej symetrii trzeba część kwadrupolową i okrupolową powyższej funkcji, zrzutować na reprezentacje grupy T_d. Otrzymana funkcja nie posiada deformacji statycznych, zatem wibracje opisane przez tę funkcję zachodzą wokół powierzchni sferycznej. Chcąc otrzymać ruch wibracyjny względem powierzchni mającej symetrię T_d trzeba wprowadzić do opisu parametry przesunięć (deformacje statyczne) $\mathring{\alpha}_{32}$. W tym celu wprowadzony jest odpowiedni operator komutujący z operatorem rzutowym, dzięki czemu nie zmienia on symetrii otrzymanych funkcji.

(2) Dla funkcji jednofononowych użyty jest operator:

$$\hat{\mathcal{T}}(\mathring{\alpha}^{(i)}_{32}) = \exp\big(-\mathring{\alpha}^{(i)}_{32}\frac{\partial}{\partial\alpha^{(i)}_{32}}\big). \tag{196}$$

Powoduje on przesunięcie w kierunku zmiennej $\alpha^{(i)}_{32}$ o wartość określoną przez deformację statyczną $\mathring{\alpha}^{(i)}_{32}$.

(3) W paśmie oktupolowym mamy mieć funkcje jednofononowe o parzystości ujemnej. W tym celu użyty jest operator rzutujący na parzystość ujemną $\frac{1}{2}(1 - \hat{I})$, gdzie $\hat{I}$ jest operatorem inwersji przestrzennej.

Budowa stanów dla pasma o parzystości dodatniej jest prostsza od pasma o parzystości ujemnej. Wynika to z tego, że część wibracyjna opisana w

względem osi przedstawionych w [2]. Różnica ta powoduje, że grupą symetrii dla zmiennej rzeczywistej α_{32} jest grupa T_d. W dalszej części pracy moje obliczenia opierają się na osiach przedstawionych w [2], co daje dla tej zmiennej odpowiednio grupę symetrii O. Obie grupy są równoliczne, posiadają identyczne nieprzywiedlne reprezentacje, klasy i charaktery.

zmiennych oktupolowych składa się funkcji zerofononowych, bez deformacji statycznej $\mathring{\alpha}_{32}^{(i)}$. W tym przypadku parametry deformacji statycznej pojawiają się w części kwadrupolowej i otrzymywane są przez operator $\hat{\mathcal{T}}(\mathring{\alpha}_{20}, \mathring{\alpha}_{22})$. W ten sposób uzyskana funkcja posiada symetrię grupy D_{2h}, która opisuje to pasmo.

Przedstawiona konstrukcja stanów dla omawianego modelu, pozwoliła uzyskać odpowiednie stany, które później zostały użyte do oszacowania przejść elektrycznych wewnątrz pasm i pomiędzy nimi. Jest ona również istotna dla obecnej pracy, ponieważ ten sam schemat budowy odpowiednich stanów, poza pewnymi szczegółami, został użyty przy tworzeniu nowych modeli przedstawionych w dalszej części.

Krótki opis wczesnej historii poszukiwań symetrii tetraedralnej w opisie jąder atomowych można znaleźć w [71]. Dodatkowo w [72] zostało opisane zastosowanie grupy T_d do opisu jądra ^{156}Dy, gdzie zmiennymi użytymi do opisu powierzchni jądrowej są zmienne rzeczywiste: kwadrupolowa α_{20} oraz oktupolowa α_{32}. Oprócz dwóch głównych jąder atomowych: ^{156}Dy i ^{156}Gd, do których zastosowano opis zawierający symetrię tetraedralną, pojawiły się również modele, które wprowadzały tę symetrię do opisu innych jąder. Jednym z przykładów jest artykuł [73], gdzie symetria T_d wykorzystana jest do obliczeń średniego pola z potencjałem Woodsa-Saxona dla izotopów ^{110}Zn.

W dalszej części pracy zostaną przedstawione dwa skonstruowane przeze mnie testowe modele kolektywne próbujące odtworzyć wyniki eksperymentalne dla gadolinu 156. Modele te oprócz części wibracyjnej są rozszerzone dodatkowo o funkcje rotacyjne. Ważną rolę w konstrukcji nowych modeli odgrywa grupa symetryzacji wynikająca z postaci zmiennych wewnętrznych użytych do opisu stanów. Główną różnicą odróżniającą te modele jest wybór zmiennych oktupolowych $\{\alpha_{3\mu}\}$. Dla pierwszego modelu zmienne te mają postać zespoloną (Z) co daje łącznie siedem zmiennych oktupolowych. Dla drugiego podejścia zmienne oktupolowe są ograniczone jedynie do zmiennych rzeczywistych (R), co zmniejsza ich liczbę do czterech. Dokładniejszy opis oraz schemat kolejnych kroków prowadzących do konstrukcji każdego z modeli jest przedstawiony w następnym rozdziale.

6 Wibracyjno-rotacyjny jądrowy model kolektywny

Jak wcześniej zostało wspomniane, konstruujemy dwa różne wibracyjno-rotacyjne modele kolektywne. W tym rozdziale przedstawiony jest ogólny schemat i kolejne kroki proponowanych konstrukcji oraz ich porównania z danymi eks-

perymentalnymi dla jądra ^{156}Gd.

Dla uproszczenia zapisu wprowadźmy następujące oznaczenia: dla dowolnego λ część rzeczywista $\alpha_{\lambda\mu}$ oznaczona jest jako $\alpha'_{\lambda\mu} = \frac{1}{2}\big(\alpha_{\lambda\mu} + \alpha^*_{\lambda\mu}\big)$, a część urojona $\alpha_{\lambda\mu}$ jako $\alpha''_{\lambda\mu} = -\frac{i}{2}\big(\alpha_{\lambda\mu} - \alpha^*_{\lambda\mu}\big)$.

Ponieważ w dalszej części tezy używamy tylko standardowego wyboru układu wewnętrznego $\alpha_{2\pm1} = 0$, $\alpha_{2-2} = \alpha_{22}$ zmienne kwadrupolowe są automatycznie zmiennymi rzeczywistymi, [50, 51, 53, 47, 74, 52, 54].

Oba przedstawione modele różnią się strukturą przestrzeni kolektywnej:

Model (Z) jest zdefiniowany przez $\{\alpha_{20},\ \alpha_{2-2} = \alpha_{22},\ \alpha_{2\pm1} = 0,\ \alpha_{30},\ \alpha_{3\pm1},\ \alpha_{3\pm2},\ \alpha_{3\pm3}\}_f$, Ω, gdzie $\{\alpha_{3\mu}\}$ są zmiennymi zespolonymi, w związku z czym opisują wszystkie możliwe kształty jądrowe. Jedynymi ograniczeniami nałożonymi na zmienne wewnętrzne są trzy warunki w części kwadrupolowej określające układ wewnętrzny oraz standardowe relacje: $\alpha^*_{\lambda\mu} = (-1)^\mu \alpha_{\lambda-\mu}$ (wzór (94)).

W modelu (R), zgodnie z wcześniejszymi rozważaniami, ograniczamy się do zbioru zmiennych $\{\alpha_{20},\ \alpha_{2-2} = \alpha_{22},\ \alpha_{2\pm1} = 0,\ \alpha_{30},\ \alpha_{31} = -\alpha_{3-1},\ \alpha_{32} = \alpha_{32},\ \alpha_{33} = -\alpha_{3-3}\}_f$, Ω, co zawęża dostępne kształty jądra atomowego. Warunki określające układ wewnętrzny są identyczne jak dla pierwszego modelu. Dodatkowo występują warunki zawężające przestrzeń oktupolową do czterowymiarowej podrzestrzeni zmiennych rzeczywistych.

Jak było wspomniane wyżej, korzystając z obu modeli próbujemy odtworzyć wyniki eksperymentalne otrzymane dla ^{156}Gd, [5, 6]. Przy czym **wykorzystujemy jedynie pewne własności symetrii** funkcji opisujących poszczególne stany energetyczne jądra. Co jest istotne, hamiltoniany jakie pojawiają się w opisie obu modeli mają charakter jedynie pomocniczy, tj. sugerują charakter fizyczny poszczególnych stanów dając ich postać początkową.

W naszym przypadku hamiltonian powinien opisywać zarówno ruchy wibracyjne jak i rotacyjne. Przy założeniu, że pomiędzy nimi nie ma sprzężeń, ich ogólną postać można zapisać następująco:

$$H = H_{vib;2} + H_{vib;3} + H_{rot}, \tag{197}$$

gdzie:

(i) $H_{vib;2}$ opisuje ruch wibracyjny w zmiennych kwadrupolowych α_{20} i α_{22}:

$$H_{vib;2} = \sum_{\mu=0,2} H_{vib;2\mu}, \tag{198}$$

(ii) $H_{vib;3}$ określa wibracje oktupolowe:

$$H_{vib;3} = \sum_{\mu=0}^{n} H_{vib;3\mu}, \tag{199}$$

gdzie n w zależności od wyboru zbioru zmiennych oktupolowych wynosi 4 lub 7,

(iii) H_{rot} odpowiada za rotacje.

Hamiltoniany pomocnicze występujące we zorach (198) i (199) mają postać hamiltonianów wielowymiarowego, zdeformowanego oscylatora harmonicznego, tj.:

$$H_{vib;\lambda\mu} = -\tfrac{\hbar^2}{2B_{\lambda\mu}} \tfrac{\partial^2}{\partial(\alpha_{\lambda\mu})^2} + \tfrac{1}{2} B_{\lambda\mu}[\omega_{\lambda\mu}]^2 (\alpha_{\lambda\mu} - (\mathring{\alpha}_{\lambda\mu}))^2, \quad \lambda = 2, 3, \tag{200}$$

gdzie $\{B_{\lambda\mu}\}$ są stałymi parametremi masowymi, a poszczególne $\mathring{\alpha}_{\lambda\mu}$ określają deformacje statyczne odpowiadające punktom równowagi wokół których zachodzi ruch wibracyjny.

Do opisu ruchu rotacyjnego wykorzystujemy jako stopnie swobody standardowe kąty Eulera $\Omega = (\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)$, określające położenie układu wewnętrznego względem laboratoryjnego.

W dalszej części potrzebna będzie postać niezmienników rotacyjnych β_λ zbudowanych ze zmiennych wibracyjnych w układzie wewnętrznym, [53, 54]:

$$\beta_\lambda^2 = \sum_\mu |\alpha_{\lambda\mu}^{lab}|^2 = \sum_\mu |\alpha_{\lambda\mu}|^2. \tag{201}$$

Ostatnia równość wynika z transformacji do układu wewnętrznego:

$$\alpha_{\lambda\mu}^{lab} = \sum_{\mu'} D_{\mu\mu'}^{\lambda}(\Omega)^* \alpha_{\lambda\mu'}. \tag{202}$$

Podstawiając (202) do wzoru na β_λ mamy:

$$\beta_\lambda^2 = \sum_\mu |\alpha_{\lambda\mu}^{lab}|^2 = \sum_{\mu,\mu',\mu''} D_{\mu\mu'}^{\lambda}(\Omega) D_{\mu\mu''}^{\lambda}(\Omega)^* \alpha_{\lambda\mu'}^* \alpha_{\lambda\mu''}. \tag{203}$$

Ponieważ $D_{\mu\mu''}^{\lambda}(\Omega)^* = D_{\mu''\mu}^{\lambda}(\Omega^{-1})$ oraz $\sum_\mu D_{\mu\mu'}^{\lambda}(\Omega) D_{\mu''\mu}^{\lambda}(\Omega^{-1}) = \delta_{\mu'\mu''}$, [49, 75], zatem

$$\beta_\lambda^2 = \sum_{\mu',\mu''} \delta_{\mu'\mu''} \alpha_{\lambda\mu'}^* \alpha_{\lambda\mu''} = \sum_{\mu'} \alpha_{\lambda\mu'}^* \alpha_{\lambda\mu'} = \sum_\mu |\alpha_{\lambda\mu}|^2. \tag{204}$$

W wybranym układzie współrzędnych β_2 ma uproszczoną postać:

$$\beta_2^2 = \alpha_{20}^2 + 2\alpha_{22}\alpha_{22}^* = \alpha_{20}^2 + 2\alpha_{22}^2. \tag{205}$$

Natomiast odpowiedni niezmiennik β_3 w zespolonych zmiennych oktupolowych $\alpha_{3\mu} = \alpha'_{3\mu} + i\alpha''_{3\mu}$, zgodnie ze wzorem (201), będzie miał postać:

$$\begin{aligned}\beta_3^2 &= \alpha_{30}^2 + 2\alpha_{31}\alpha_{31}^* + 2\alpha_{32}\alpha_{32}^* + 2\alpha_{33}\alpha_{33}^* \\ &= \alpha_{30}^2 + 2(\alpha'^2_{31} + \alpha'^2_{32} + \alpha'^2_{33} + \alpha''^2_{31} + \alpha''^2_{32} + \alpha''^2_{33}).\end{aligned} \tag{206}$$

W przypadku rzeczywistych zmiennych oktupolowych β_3 ma trochę prostszą postać:

$$\beta_3^2 = \alpha_{30}^2 + 2(\alpha'^2_{31} + \alpha'^2_{32} + \alpha'^2_{33}). \tag{207}$$

Kolejną istotną informacją określającą każdy z rozważanych modeli jest grupa symetryzacji $\overline{G}_s$ pozwalająca otrzymać jednoznaczną transformację z układu laboratoryjnego do wewnętrznego. Ponieważ w obu modelach część kwadrupolowa jest taka sama, zatem jedynie wprowadzenie dwóch różnych zbiorów zmiennych oktupolowych implikuje postać grupy symetryzacji:

(Z) grupa $\overline{\mathbf{O}}$ dla modelu o zmiennych zespolonych,

(R) grupa $\overline{\mathbf{D}}_{\mathbf{4;y}}$ dla modelu o zmiennych rzeczywistych.

Oprócz grupy symetryzacji istotna jest również przynależność funkcji bazowych tworzących stany do nieprzywiedlnych reprezentacji grupy $\overline{G}_s$.

W dalszym opisie do ich oznaczenia używamy symboli Γ_1, Γ_2, Γ_3, które odpowiednio odnoszą się do nieprzywiedlnych reprezentacji części kwadrupolowej, oktupolowej i rotacyjnej. Gdy pojawiają się równoważne reprezentacje wówczas potrzebny jest indeks κ_i, $i = 1, 2, 3$, który je rozróżnia.

W przypadku, gdy mamy reprezentację wielowymiarową potrzebne jest dodatkowe oznaczenie odróżniające od siebie wektory bazowe. We wprowadzonych oznaczeniach dodatkowy symbol znajduje się za znakiem ";" występującym za indeksem dolnym i opisującym rodzaj ruchu. We wzorach (208-211) oznaczony jest on przez a.

Korzystając z powyższych oznaczeń iloczyn skalarny w każdej z podprzestrzeni określony jest następująco:

w przestrzeni kwadrupolowej $L^2\big(\alpha_{20}, \alpha_{22}\big)$ ma on postać:

$$\begin{aligned}&\langle\psi^{\Gamma'_{1;\kappa'_1}}_{vib2;a'}(\alpha_{20}, \alpha_{22})|\psi^{\Gamma_{1;\kappa_1}}_{vib2;a}(\alpha_{20}, \alpha_{22})\rangle = \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} d\alpha_{20}d\alpha_{22}\ \psi^{\Gamma'_{1;\kappa'_1}}_{vib2;a'}(\alpha_{20}, \alpha_{22})^*\psi^{\Gamma_{1;\kappa_1}}_{vib2;a}(\alpha_{20}, \alpha_{22});\end{aligned} \tag{208}$$

w przestrzeni oktupolowej w zależności od wyboru podprzestrzeni opisującej oktupolowy ruch wibracyjny:

(a) w modelu (Z):

$$\begin{aligned}&\langle\psi^{p';\Gamma'_{2;\kappa'_2}}_{vib3;a'}(\{\alpha_{3\mu}\})|\psi^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}_{vib3;a}(\{\alpha_{3\mu}\})\rangle=\\&=\int_{\mathbb{R}^7}d\alpha_{30}d\alpha'_{31}d\alpha'_{32}d\alpha'_{33}d\alpha''_{31}d\alpha''_{32}d\alpha''_{33}\ \psi^{p';\Gamma'_{2;\kappa'_2}}_{vib3;a'}(\{\alpha_{3\mu}\})^*\psi^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}_{vib3;a}(\{\alpha_{3\mu}\}),\end{aligned}\tag{209}$$

(b) w modelu (R):

$$\begin{aligned}&\langle\psi^{p';\Gamma_{2;\kappa_2}}_{vib3;a'}(\{\alpha_{3\mu}\})|\psi^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}_{vib3;a}(\{\alpha_{3\mu}\})\rangle=\\&=\int_{\mathbb{R}^4}d\alpha_{30}d\alpha'_{31}d\alpha'_{32}d\alpha'_{33}\ \psi^{p';\Gamma_{2;\kappa_2}}_{vib3;a'}(\{\alpha_{3\mu}\})^*\psi^{p;\Gamma_{2;\kappa}}_{vib3;a}(\{\alpha_{3\mu}\}),\end{aligned}\tag{210}$$

gdzie p oznacza parzystość dodatnią (+) lub ujemną (−) funkcji oktupolowej;

w przestrzeni opisującej ruch rotacyjny mamy:

$$\begin{aligned}&\langle R^{JM}_{\Gamma'_{3;\kappa'_3};a'}(\Omega)|R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3};a}(\Omega)\rangle=\\&=\frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi}d\alpha\int_0^{\pi}\sin\beta d\beta\int_0^{2\pi}d\gamma\ R^{JM}_{\Gamma'_{3;\kappa'_3};a'}(\Omega)^*R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3};a}(\Omega).\end{aligned}\tag{211}$$

6.1 Pasma energetyczne modelu kolektywnego

Każdy z modeli kolektywnych, zbudowanych w oparciu o własności symetrii funkcji opisujących jądro atomowe, określa jedynie pewien interesujący nas fragment widma energetycznego obserwowany w eksperymentach [5, 6]. Celem tej pracy są metody badania struktury symetrii niskoleżących stanów jądrowych na przykładzie jądra ^{156}Gd. Można je przyporządkować trzem pasmom energetycznym, z których pierwsze jest zbudowane ze stanów 0^+, 2^+, 4^+ tworząc pasmo kwadrupolowe, a drugie i trzecie jest zbudowane ze stanów oktupolowych o nieparzystym momencie pędu $J = 3^-, 5^-$ oraz o parzystym momencie pędu $J = 2^-, 4^-$. Oczywiście istnieje możliwość rozszerzenia opisanych modeli.

Używane stany do opisania jądra atomowego są określone w 12-sto lub 9-cio wymiarowej przestrzeni kolektywnej. Niestety, nawet przy obecnie istniejących komputerach, obliczenia w tylu wymiarach wymagają bardzo dużej

ilości czasu procesora oraz wielkiej pamięci operacyjnej. Z tego powodu obliczenia były wykonywane w kilku krokach, które są przedstawione w dalszej części podrozdziału.

Pierwszy model (Z) został skonstruowany w celu opisania jąder atomowych, które zgodnie ze wcześniejszymi obliczeniami, mogą posiadać symetrię tetraedralną. Z tego powodu w dalszych rozważaniach przyjęto istnienie pełnego zbioru wewnętrznych zmiennych oktupolowych, z których można zbudować powierzchnię jądrową o symetrii $\overline{T}_d$. Również wybór jądra atomowego ^{156}Gd opierał się na możliwości istnienia tej symetrii w jego strukturze.

Ze względu na wybór zmiennych wewnętrznych zachowanie jednoznaczności transformacji pomiędzy układem laboratoryjnym i wewnętrznym narzuca grupa symetryzacji $\overline{O}$, która wpływa na postać szukanych stanów. Dodatkowo w modelu tym zostały wprowadzone następujące założenia dotyczące budowy poszczególnych pasm energetycznych:

(i) Pasmo kwadrupolowe o parzystości dodatniej określone jest przez stany, które opisują wibracje wokół powierzchni zapisanej za pomocą zmiennych rzeczywistych α_{20} oraz α_{22}. Powierzchnia ta posiadającą symetrię elipsoidy trójosiowej, tj. odpowiada grupie $\overline{D}_2$. Punkty równowagi wokół których następują wibracje określone są za pomocą kwadrupolowych deformacji statycznych $\mathring{\alpha}_{20}$, $\mathring{\alpha}_{22}$ i występują w funkcjach $\psi_{vib2}^{\Gamma_{1;\kappa_1}}(\{\alpha_{2\nu}\})$, $\nu = 0, 2$. Poza stanem podstawowym 0^+ opisanym za pomocą funkcji zerofononowej, pozostałe funkcje opisujące część kwadrupolową 2^+ i 4^+ mogą również zawierać wzbudzenia odpowiadające funkcjom jednofononowym zdeformowanego oscylatora harmonicznego.

Przy założeniu, że w paśmie kwadrupolowym wzbudzenia mogą jedynie pochodzić od części zapisanej za pomocą zmiennych α_{20} i α_{22} otrzymujemy, że funkcje oktupolowe $\psi_{vib3}^{(+);\Gamma_{2;\kappa_2}}(\{\alpha_{3\nu}\})$ mają postać zerofononowych funkcji zdeformowanego oscylatora harmonicznego. W tej części przyjmujemy zerowe, oktupolowe deformacje statyczne. Zerofononowość funkcji oktupolowej oraz zerowe wartości deformacji statycznych powodują, że musi ona należeć do symetrycznej reprezentacji A_1 grupy symetryzacji $\overline{O}$.

(ii) Pasmo oktupolowe o parzystości ujemnej, posiada w części oktupolowej $\psi_{vib3}^{(-);\Gamma_{2;\kappa_2}}(\{\alpha_{3\nu}\})$, jedną niezerową deformację statyczną $\mathring{\alpha}''_{32}$. Dla kwadrupolowej funkcji bazowej $\psi_{vib2}^{\Gamma_{1;\kappa_1}}(\alpha_{20}, \alpha_{22})$ zostały rozważone dwa przypadki: gdy nie ma deformacji statycznej oraz gdy $\mathring{\alpha}_{20}$, $\mathring{\alpha}_{22}$ mają wartości różne od zera. W pierwszym przypadku pasmo oktupolowe opisuje wibracje wokół powierzchni jądrowej opisanej przez zmienną

α''_{32}, której odpowiada szukana symetria $\overline{T}_d$. W drugim przypadku powierzchnia jądrowa oprócz zmiennej α''_{32} opisana jest przez α_{20} i α_{22}. Wprowadzenie dodatkowych zmiennych redukuje grupę symetrii do $\overline{D}_2$. W obu przypadkach funkcje kwadrupolowe są rozwiązaniem zerofononowym dla $H_{vib;2}$, zatem, gdy nie ma deformacji statycznej funkcja musi należeć do reprezentacji A_1. Gdy pojawiają się niezerowe deformacje statyczne, wówczas funkcje kwadrupolowe mogą należeć do innej reprezentacji niż skalarna. Dla konstrukcji funkcji oktupolowej używamy jednofononowego rozwiązania hamiltonianu $H_{vib;3}$, co daje kilka możliwości wyboru reprezentacji grupy symetryzacji $\overline{O}$.

Wykorzystane w konstrukcji wartości kwadrupolowych deformacji statycznych przyjęte są zgodnie z oszacowaniami mikroskopowymi: $\mathring{\alpha}_{20} = 0,34$, $\mathring{\alpha}_{22} = 10^{-5}$, [76]. Nie są więc one wolnymi parametrami modeli. Wartości pozostałych parametrów uzyskane są za pomocą metody najmniejszych kwadratów, tak aby otrzymane stany najlepiej odtwarzały wartości eksperymentalne [5, 6].

W efekcie analizujemy jedynie tylko serię stanów przedstawionych na poniższym rysunku:

	——— 5^-	——— 4^-
——— 4^+	——— 3^-	——— 2^-
——— 2^+	$\mathring{\alpha}_{20}, \mathring{\alpha}_{22} = 0$ lub $\mathring{\alpha}_{20} = 0{,}34,\ \mathring{\alpha}_{22} = 10^{-5}$	
——— 0^+	$\mathring{\alpha}_{32} \neq 0$	
$\mathring{\alpha}_{20} = 0{,}34$, $\mathring{\alpha}_{22} = 10^{-5}$, $\mathring{\alpha}_{32} = 0$		

Rysunek 2: Stany dla modelu o zmiennych zespolonych (Z)

Model o zmiennych zespolonych (Z) jest konstruowany w trzech krokach. Pierwszy polega na znalezieniu postaci funkcji bazowych oraz wszystkich możliwych kombinacji stanów dla wybranych trzech pasm energetycznych. Część ta opiera się głównie na własnościach algebraicznych wektorów bazowych. W celu otrzymania jawnej postaci funkcji bazowych napisane zostały odpowiednie programy w Mathematice.

Druga część konstrukcji dotyczy wyliczenia parametrów opisujących powyższe funkcje. Znalezienie ich wartości było możliwe dzięki programowi napisanemu w Fortranie przez A. Dobrowolskiego. Program ten korzystał z procedury najmniejszych kwadratów i dopasował wyliczone $B(E2)$ do danych eksperymentalnych.

W trzecim etapie konstrukcji omawianego modelu zostały przeprowadzone obliczenia zredukowanych przejść międzypasmowych $B(E1)$ przy korzystaniu ze skonstruowanych wcześniej stanów.

W drugim modelu (R), ze względu na to, że większość obliczeń mikroskopowych ogranicza się jedynie do rzeczywistych wartości zmiennych $\alpha_{\lambda\mu}$, zarówno zmienne kwadrupolowe jaki i oktupolowe są rzeczywiste. Taki wybór zmiennych powoduje zmianę grupy symetryzacji na $\overline{D}_{4;y}$, co wpłynęło również na postać rozważanych stanów.

W tym modelu analiza prowadzi do następującej struktury wybranych pasm energetycznych:

(i) Pasmo kwadrupolowe, składające się ze stanów $0^+,\ 2^+,\ 4^+$, posiada niezerowe kwadrupolowe deformacje statyczne identyczne jak w modelu wcześniejszym (Z). Oznacza to, że wibracje opisywane przez to pasmo, podobnie jak poprzednio, zachodzą wokół powierzchni jądrowej opisanej przez symetrię $\overline{D}_2$. Funkcje opisujące stany z tego pasma również mogą mieć co najwyżej wzbudzenie jednofononowe w części kwadrupolowej. Takie założenie zawęża wybór reprezentacji opisujących oktupolową część wibracyjną do A_1 grupy symetryzacji $\overline{D}_{4;y}$.

(ii) Dwa pasma oktupolowe składają się odpowiednio z nieparzystych $3^-,\ 5^-$ oraz parzystych momentów pędu $2^-,\ 4^-$. Dla tych pasm oprócz statycznych deformacji kwadrupolowych mogą potencjalnie istnieć niezerowe statyczne deformacje oktupolowe $\mathring{\alpha}'_{30},\ \mathring{\alpha}'_{31},\ \mathring{\alpha}'_{32},\ \mathring{\alpha}'_{33}$. Odpowiada to powierzchni jądrowej opisanej przez rzeczywiste zmienne α_{20}, α_{22}, α_{30}, α'_{31}, α'_{32}, α'_{33} posiadającej symetrię opisaną przez grupę $\overline{C}_{s;y}$. W przypadku statycznych deformacji oktupolowych ich wartości znajdowane są metodą najmniejszych kwadratów. Dokładniejszy opis ich otrzymywania przedstawiony jest w dalszej części.

Analizowana sytuacja przedstawiona jest graficznie na poniższym rysunku:

	——— 5^-	——— 4^-
——— 4^+	——— 3^-	——— 2^-
——— 2^+	$\mathring{\alpha}_{20}, \mathring{\alpha}_{22} \neq 0$	$\mathring{\alpha}_{20} = 0, \mathring{\alpha}_{22} \neq 0$
——— 0^+	$\mathring{\alpha}_{30}, \mathring{\alpha}'_{3\mu} \neq 0$	$\mathring{\alpha}_{30}, \mathring{\alpha}'_{3\mu} \neq 0$
$\mathring{\alpha}_{20}, \mathring{\alpha}_{22} \neq 0$		
$\mathring{\alpha}_{30}, \mathring{\alpha}'_{3\mu} = 0$		

Rysunek 3: Stany dla modelu o zmiennych rzeczywistych (R)

Model o zmiennych rzeczywistych (R) również został skonstruowany w trzech krokach. W pierwszym zostały znalezione parametry opisujące stany pasma kwadrupolowego i oktupolowego o nieparzystym momencie pędu, które najlepiej odtwarzały przejścia wewnątrzpasmowe. W drugim kroku zostały wybrane takie pasma, które dodatkowo odtwarzały dość dobrze przejścia międzypasmowe. W trzecim etapie zostało skonstruowane pasmo oktupolowe o parzystym momencie pędu.

W każdym z trzech etapów do wszystkich obliczeń zostały wykorzystane moje programy napisane w Mathematice.

Elementy przedstawionych grup znajdują się w dodatku A.

6.2 Budowa funkcji bazowych

W tym podrozdziale przedstawiona jest dokładniej metoda otrzymywania oraz ogólna postać funkcji bazowych wykorzystywanych do budowy stanów. W przedstawionych modelach końcowa postać każdego z rozważanych stanów zależy głównie od skonstruowanych nieprzywiedlnych reprezentacji, do których należą funkcje bazowe. Szczegółowa postać każdej z funkcji bazowych na tym etapie konstrukcji modeli nie jest istotna. Są one wykorzystywane dopiero podczas liczenia wartości zredukowanych prawdopodobieństw przejść między i wewnątrzpasmowych. Jawne postacie otrzymanych funkcji bazowych przedstawione są w dodatku B oraz C.

Zgodnie z wcześniejszymi założeniami każda funkcja opisująca stan jądra składa się z trzech funkcji bazowych: dwóch opisujących wibracyjny ruch kwadrupolowy $\psi_{vib2;a_1}^{\Gamma_{1;\kappa_1}}(\alpha_{20}, \alpha_{22})$ i oktupolowy $\psi_{vib3;a_2}^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}(\{\alpha_{3\nu}\})$ oraz jednej określającej rotację $R_{\Gamma_{3;\kappa_3};a_3}^{JM}(\Omega)$.

Przy założeniu że nie ma sprzężeń pomiędzy poszczególnymi ruchami, funkcja opisująca stan jądra zbudowana jest z iloczynów trzech funkcji bazowych, tj. z następujących członów:

$$\psi_{vib2;a_1}^{\Gamma_{1;\kappa_1}}(\alpha_{20}, \alpha_{22})\psi_{vib3;a_2}^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}(\{\alpha_{3\mu}\})R_{\Gamma_{3;\kappa_3};a_3}^{JM}(\Omega). \tag{212}$$

Wprowadzone oznaczenia części rotacyjnej $R_{\Gamma_{3;\kappa_3};a_3}^{JM}$ określają funkcję o momencie pędu J i należącą do reprezentacji Γ_3 grupy $\overline{G}_s$, gdzie $\overline{G}_s = \overline{O},\ \overline{D}_{4;y}$. W przypadku reprezentacji równoważnych oraz wielowymiarowych łatwiej jest rozróżnić funkcje bazowe dodając dodatkowy indeks opisujący transformację tej funkcji określoną przez nieprzywiedlną reprezentację Γ_3' grupy $\overline{D}_2$ działającej w przestrzeni rotora. Zatem funkcje rotacyjne mają konstrukcje zgodnie z łańcuchem grupowym $\overline{D}_2 \subset \overline{G}_s$. W przypadku, gdy pominięcie indeksów Γ_3' nie powoduje problemów w odróżnieniu funkcji bazowych lub rozważana jest jedynie ogólna ich postać, wówczas, dla uproszczenia notacji,

w opisie funkcji rotacyjnych użyte są tylko indeksy Γ_3. Zatem oznaczenie rotacyjnych funkcji bazowych ma dwie postacie:

(i) pierwsza dotyczy ogólnych wzorów, gdzie istotna jest tylko reprezentacja grupy symetryzacji $\overline{G}_s$ do której należy dany wektor bazowy, wówczas wystarczy oznaczenie $R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3};a_3}$;

(ii) w przypadku, gdy chcemy rozróżniać otrzymane funkcje bazowe należące do różnych reprezentacji równoważnych, wówczas wygodniej jest użyć oznaczenia $R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3}\Gamma'_3;a_3}(\Omega)$, gdzie a_3 rozróżnia wektory bazowe w Γ_3.

Pełniejszy opis funkcji rotacyjnych jest umieszczony w dodatku B i C, gdzie wypisane są wszystkie otrzymane funkcje dla momentu pędu $J = 0, 1, 2, 3, 4, 5$.

6.2.1 Procedura uzyskania funkcji bazowych

Przedstawiona w dalszej części procedura oparta jest na zastosowaniu operatora rzutowego na tzw. funkcje początkowe, które zostały wcześniej wybrane tak aby spełniały odpowiednie warunki (dokładniejszy ich opis znajduje się w dalszej części rozdziału). Istnieją dwie możliwe postacie operatora rzutowego. W zależności od tego czy posługujemy się charakterami reprezentacji, czy pełnymi elementami macierzowymi tych reprezentacji. W mojej pracy posługuję się obiema metodami w zależności od tego czy rzut funkcji początkowych jest na reprezentację jedno czy wielowymiarową grupy symetryzacji.

Znając charaktery elementów grupy laboratoryjnej G dowolnej nieprzywiedlnej reprezentacji Γ można zapisać operator rzutowania następująco:

$$P^{\Gamma}_{G} = \frac{\dim(\Gamma)}{\mathrm{card}(G)} \sum_{g\in G} \chi^{(\Gamma)}(g)^* g, \tag{213}$$

gdzie $\mathrm{card}(G)$ jest liczbą elementów grupy, $\dim(\Gamma)$ oznacza wymiar nieprzywiedlnej reprezentacji Γ, $\chi^{(\Gamma)}(g)$ jest charakterem elementu g grupy G. Ponieważ charaktery elementów grupowych należących do tej samej klasy są identyczne, zatem podany wzór można uprościć do postaci:

$$P^{\Gamma}_{G} = \frac{\dim(\Gamma)}{\mathrm{card}(G)} \sum_{k=1}^{N} \chi^{(\Gamma)_k}(g)^* \sum_{g\in cl_k} g, \tag{214}$$

gdzie N jest liczbą klas dla danej nieprzywiedlnej reprezentacji Γ, $\chi^{(\Gamma)_k}(g)$ oznacza charakter elementu $g \in G$ należącego do klasy k, cl_k określa klasę k elementów sprzężonych.

W przypadku reprezentacji jednowymiarowych postacie operatora opisanego przez macierze reprezentacji oraz za pomocą charakterów mają taką samą postać. Wynika to z tego, że macierze dla jednowymiarowych reprezentacji składają się z jednego elementu, który można przedstawić za pomocą charakterów grupy.

Jeśli wymiar reprezentacji jest większy od jedynki, wówczas otrzymana funkcja po zrzutowaniu za pomocą operatora zbudowanego z charakterów, jest kombinacją fukcji bazowych. Z tego powodu czasami trudno jest odtworzyć jak powinny wyglądać wektory bazowe, a interesuje nas baza ortogonalna rozpinająca niezmienniczą podprzestrzeń. W tym przypadku wygodniej jest użyć ogólniejszej formy operatora rzutowego. Operator ten zależy od postaci macierzy reprezentacji Γ:

$$P_{ab}^{\Gamma} = \frac{\dim(\Gamma)}{\mathrm{card}(G)} \sum_{g \in G} \Delta_{ab}^{\Gamma}(g)^* g, \tag{215}$$

gdzie $\Delta_{ab}^{\Gamma}(g)$ oznacza element macierzy reprezentacji $\Delta^{\Gamma}(g)$ znajdujący się w wierszu a i kolumnie b.

Korzystając z uogólnionego operatora rzutowego można od razu uzyskać ortogonalne funkcje bazowe rozpinające niezmienniczą podprzestrzeń dla danej reprezentacji. Procedura ta składa się z kilku kroków i szczegółowo opisana jest dla grup Liego oraz grup skończonych w [77, 2]. Poniżej przedstawiona jest ona tylko dla grup skończonych.

Celem tego postępowania jest otrzymanie rozkładu przestrzeni Hilberta $\mathcal{K}$ na ortogonalne podprzestrzenie określone przez nieprzywiedlną reprezentację Γ grupy G, [77].

Istnieją przypadki, gdy określona reprezentacja nieprzywiedlna Γ występuje wielokrotnie przy rozkładzie na podprzestrzenie niezmiennicze przestrzeni $\mathcal{K}$. Do otrzymania takiego rozkładu używa się operatora rzutowego P_{pq}^{Γ} określonego przez macierze reprezentacji $\Delta^{\Gamma}(g)$ grupy G w przestrzeni niezmienniczej $\mathcal{K}^{\Gamma}$ o wymiarze $\dim(\Gamma)$ policzonych w bazie $|v_1\rangle, |v_2\rangle, \ldots, |v_{\dim(\Gamma)}\rangle$.

Załóżmy, że mamy wektor $|s;q\rangle \equiv P_{pq}^{\Gamma}|u\rangle$, który powstał z rzutu wektora $|u\rangle$ z przestrzeni $\mathcal{K}$ na podprzestrzeń reprezentacji Γ, gdzie wartość indeksu q jest ustalona. Otrzymany w ten sposób wektor transformuje się jak wektor bazowy o numerze p ($|v_p\rangle$) podprzestrzeni $\mathcal{K}^{\Gamma}$ odpowiadającej reprezentacji Γ:

$$g|\Gamma;p\rangle = \sum_r D_{rp}^{\Gamma} P_{rq}^{s}|u\rangle = \sum_r D_{rp}^{\Gamma}|\Gamma;r\rangle. \tag{216}$$

Wykorzystując tę własność można znaleźć metodę otrzymywania ortogonalnych wektorów bazowych rozpinających podprzestrzeń $\mathcal{K}^{\Gamma}$.

Chcąc rozłożyć przestrzeń $\mathcal{K}$ na n_Γ ortogonalnych podprzestrzeni $\mathcal{K}^\Gamma_{n_i}$, $i = 1, 2, \ldots, n_\Gamma$ należy postępować według następujących kroków:

(i) Pierwszym krokiem jest znalezienie podprzestrzeni $\mathcal{K}^\Gamma_q$, którą otrzymuje się z przestrzeni $\mathcal{K}$ poprzez użycie operatora rzutowego P^Γ_{qq}, tj.

$$\mathcal{K}^\Gamma_q = P^\Gamma_{qq}\mathcal{K}, \tag{217}$$

gdzie Γ określa reprezentację nieprzywiedlną, q jest dowolne ale ustalone.

(ii) Następnie trzeba wybrać bazę ortogonalną w podprzestrzeni $\mathcal{K}^\Gamma_q$ (o ile nie jest ona podprzestrzenią trywialną, składającą się tylko z wektora zerowego), tj. $|v_1\rangle, |v_2\rangle, \ldots, |v_{n_\Gamma}\rangle$, gdzie n_Γ jest wymiarem podprzestrzeni $\mathcal{K}^\Gamma_q$.

(iii) Kolejnym krokiem jest zastosowanie poniższego wzoru dla ustalonego q oraz $p = 1, 2, \ldots, \dim\Gamma$:

$$|\Gamma; p\rangle = P^\Gamma_{pq}|v_i\rangle, \tag{218}$$

do każdego z wektorów bazowych $|v_i\rangle$, $i = 1, 2, \ldots, n_\Gamma$. Co daje dla określonego i ortogonalną bazę podprestrzeni $\mathcal{K}^\Gamma_{n_i}$.

Dzięki powyższemu schematowi można otrzymać n_Γ ortogonalnych podprzestrzeni $\mathcal{K}^\Gamma_{n_\Gamma}$, które są określone przez nieprzywiedlną reprezentację Γ.

Przedstawione powyżej opisy dotyczą działania w układzie laboratoryjnym. Macierze reprezentacji oraz charaktery dla grup można znaleźć między innymi w [2, 9] lub [10]. Jawna postać macierzy reprezentacji przedstawiona jest w [2][4]. Są one otrzymane w przestrzeni funkcji $\mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$, w zmiennych kartezjańskich x, y, z. Ponieważ w modelu kolektywnym ruch wibracyjny i rotacyjny opisany jest za pomocą zmiennych kolektywnych w układzie wewnętrznym, zatem pojawiło się pytanie o związek pomiędzy reprezentacjami otrzymanymi w [2], a reprezentacjami w przestrzeniach zmiennych kartezjańskich określonych w układzie laboratoryjnym.

[4] W podanych pozycjach, [2], [9], [10], występują różnice w wyborze bazy, dwie ostatnie książki mają identyczne wektory bazowe. W pierwszej książce nie ma podanej jawnie bazy kartezjańskiej, a jedynie postać macierzy reprezentacji. Na ich podstawie oraz opierając się na przedstawionej tam definicji obrotów została znaleziona potrzebna baza. Dokładniejszy opis tego postępowania znajduje się w dodatku C.

6.2.2 Związki pomiędzy działaniem grupy G oraz $\overline{G}_s$ na zmienne kolektywne

Zgodnie z [49, 75, 78] obrót prawoskrętnego układu współrzędnych XYZ, w trójwymiarowej przestrzeni, o kąty Eulera (α, β, γ) definiowany jest na dwa równoważne sposoby:

(i) Początkowy układ współrzędnych XYZ obracany jest wokół osi OZ o kąt α, co daje nowy układ $X'Y'Z'$, gdzie oś $OZ' = OZ$. Następnie obracany jest układ primowany o kąt β wokół osi OY'. Osie tego układu oznaczone są jako $X''Y''Z''$, gdzie $OY'' = OY'$. Na końcu obracany jest uzyskany układ $X''Y''Z''$ o kąt γ wokół osi OZ''.

(ii) Równoważny obrót można przedstawić za pomocą rotacji wokół początkowego układu współrzędnych XYZ: pierwszy obrót jest o kąt γ wokół osi OZ, następnie o kąt β wokół osi OY, ostatni jest obrotem o kąt α wokół osi OZ.

Macierz obrotu $\mathcal{R}$ określona jest za pomocą kątów Eulera (α, β, γ), [49, 78]:

$$\mathcal{R}=\begin{bmatrix} \cos\alpha\cos\beta\cos\gamma-\sin\alpha\sin\gamma & -\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma-\sin\alpha\cos\gamma & \cos\alpha\sin\beta \\ \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma+\cos\alpha\sin\gamma & -\sin\alpha\cos\beta\sin\gamma+\cos\alpha\cos\gamma & \sin\alpha\sin\beta \\ -\sin\beta\cos\gamma & \sin\beta\sin\gamma & \cos\beta \end{bmatrix} \tag{219}$$

Związek pomiędzy wersorami układu rotującego $\vec{e_i}\,'$ i układu początkowego $\vec{e_i}$ ma postać, [49, 78]:

$$\vec{e_i}\,' = \sum_k \mathcal{R}_{ki}\vec{e_k},\ i, k = x, y, z. \tag{220}$$

Stąd działanie obrotu na współrzędne wektora $\vec{A} = (A_1, A_2, A_3)$, jest określone:

$$A_i' = \sum_k \mathcal{R}_{ki}A_k, \tag{221}$$

gdzie A'_i są współrzędnymi wektora $\vec{A}'$ w układzie obróconym, [49][5].

Podana definicja macierzy obrotu oraz transformacji współrzędnych wektora może być również przedstawiona w inny sposób, np. tak jak w [75], gdzie macierz obrotu jest macierzą transponowaną do macierzy $\mathcal{R}$ przedstawionej w [49]. Wówczas przekształcenie współrzędnych wektora do układu rotującego ma postać:

$$A'_i = \sum_k \mathcal{R}^T_{ik} A_k, \; i, k = x, y, z. \tag{223}$$

Mimo różnicy w definicjach obrotów, jak i w działaniach ich na współrzędne wektora jest to identyczne działanie jak u [49].

Znając sposób transformacji współrzędnych kartezjańskich wektora $\vec{A}$ oraz korzystając ze związku tych współrzędnych i funkcji sferycznych, [75, 49, 78]:

$$\begin{aligned} A_x &= \sqrt{\tfrac{2\pi}{3}}|\vec{A}|\{Y_{1-1}(\theta,\varphi) - Y_{11}(\theta,\varphi)\}, \\ A_y &= i\sqrt{\tfrac{2\pi}{3}}|\vec{A}|\{Y_{1-1}(\theta,\varphi) + Y_{11}(\theta,\varphi)\}, \\ A_z &= \sqrt{\tfrac{4\pi}{3}}|\vec{A}|Y_{10}(\theta,\varphi) \end{aligned} \tag{224}$$

widzimy, że powyższe kombinacje liniowe funkcji sferycznych $Y_{1M}(\theta,\varphi),\ M = 0, \pm 1$ transformują się jak A_x, A_y, A_z, czyli zgodnie ze wzorem (221). Dowolną funkcję sferyczną $Y_{JM}(\theta,\varphi)$ można przedstawić za pomocą sprzężonej funkcji Wignera zgodnie ze wzorem, [75, 49, 78]:

$$Y_{JM}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2J+1}{4\pi}} D^J_{M0}(\theta,\varphi,\chi)^*. \tag{225}$$

Dodatkowo mając wektory bazowe w przestrzeni $L^2(SO(3))$ jądra atomowego o momencie pędu J, [57] (dodatki B,C):

$$r^J_{MK}(\theta,\varphi,\chi) = \sqrt{2J+1} D^J_{MK}(\theta,\varphi,\chi)^*, \tag{226}$$

[5] W rosyjskiej wersji "Quantum theory of angular momentum", [78], transformacja współrzędnych wektora do nowego układu ma postać:

$$A'_i = \sum_k \mathcal{R}_{ik} A_k. \tag{222}$$

Co oznacza, że suma jest po drugim indeksie, a nie po pierwszym jak w wersji angielskiej [49].

Trzeba pamiętać, że wersja rosyjska (222) zawiera błąd, przez co nie otrzymuje się (221), które odpowiada definicji działaniu grupy obrotów na współrzędne wektora.

Zgodnie z [75], [49], [78] odpowiednie kombinacje funkcji sferycznych, dla $l = 1$, transformują się pod działaniem obrotów laboratoryjnych jak współrzędne kartezjańskie, zatem w [78] wzór (222) powinien mieć postać (221).

można zapisać współrzędne kartezjańskie A_x, A_y, A_z za pomocą nowej funkcji $r^{J=1}_{MK}(\theta, \varphi, \chi)$. Otrzymaliśmy zatem, z dokładnością do współczynnika, że współrzędne kartezjańskie A_x, A_y, A_z transformują się identycznie jak odpowiednie kombinacje funkcji rotacyjnych $r^1_{1K}(\Omega)+r^1_{-1K}(\Omega)$, $r^1_{1K}(\Omega)-r^1_{-1K}(\Omega)$, $r^1_{0K}(\Omega)$. Działanie grupy obrotów $SO(3)$ na funkcje $r^J_{MK}(\Omega)$ jest zdefiniowane następująco [57]:

$$\begin{aligned} gr^J_{MK}(\Omega) = \textstyle\sum_{M'} D^J_{M'K}(g) r^J_{M'K}(\Omega), \\ g \in SO(3). \end{aligned} \tag{227}$$

W przypadku, gdy rozważamy działanie grupy obrotów laboratoryjnych na bazę kartezjańską, będącą funkcjami $f(x,y,z)$, mamy ($x = x_1, y = x_2, z = x_3$):

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{R}} f(x,y,z) = f(\mathcal{R}^{-1}x, \mathcal{R}^{-1}y, \mathcal{R}^{-1}z) = f(\textstyle\sum_k \mathcal{R}^{-1}_{k1}x_k, \sum_k \mathcal{R}^{-1}_{k2}x_k, \sum_k \mathcal{R}^{-1}_{k3}x_k) \\ = f(\textstyle\sum_k \mathcal{R}_{1k}x_k, \sum_k \mathcal{R}_{2k}x_k, \sum_k \mathcal{R}_{3k}x_k), \\ \mathcal{R}^{-1} = \mathcal{R}^T, \end{aligned} \tag{228}$$

gdzie macierz $\mathcal{R}$ jest określona wzorem (219).

Zatem transformacja funkcji bazowych w zmiennych x, y, z jest opisana macierzą transponowaną do macierzy określającej geometryczny obrót zmiennych kartezjańskich. Jest to istotne ponieważ np. w [2] macierze opisujące działanie poszczególnych elementów grupy $G \subset SO(3)$ wynikają z działania na funkcje bazowe w podprzestrzeni kartezjańskiej, czyli wykorzystywany jest wzór (228).

Porównując macierze reprezentacji otrzymane dla bazy kartezjańskiej oraz dla działania grupy $SO(3)$ w bazie zbudowanej z trzech możliwych wektorów $r^1_{1K}(\Omega) + r^1_{1K}(\Omega), r^1_{1K}(\Omega) + r^1_{-1K}(\Omega), r^1_{0K}(\Omega)$, otrzymujemy zależność opisaną przez transpozycję macierzy obrotu. Uogólniając ten związek na dowolną multipolowość możemy korzystać w dalszych obliczeniach z macierzy nieprzywiedlnych reprezentacji przedstawionych w [2].

Zgodnie z [7, 8] macierze reprezentacji dla grupy wewnętrznej są transponowane do macierzy reprezentacji laboratoryjnej. Zatem dla grupy wewnętrznej są one równe macierzom reprezentacji uzyskanych dla bazy kartezjańskiej. Otrzymane zależności pomiędzy macierzami obrotów działających w układzie laboratoryjnym na rotacyjne funkcje bazowe $\mathcal{R}r^J_{MK}(\Omega)$ i współrzędne kartezjańskie $\mathcal{R}A_k,\ k = x, y, z$ oraz dla grupy wewnętrznej $\overline{G} \subset \overline{SO(3)}$ działającej na funkcje rotacyjne $\overline{\mathcal{R}}r^J_{MK}(\Omega)$ są przedstawione w tabeli 3. Macierz $\Delta(g)$ oznacza macierz obrotu odpowiadająca elementowi $g \in G \subset SO(3)$ działającego na funkcje $f(x,y,z)$, [2].

działanie grupy obrotów na bazę	macierze rep. przedstawione za pomocą $\Delta(g)$
$\mathcal{R}(g)f(x,y,z)$	$\Delta(g)$
$\mathcal{R}(g)r^J_{MK}(\Omega)$	$\Delta^T(g)$
$\mathcal{R}(g)A_k$	$\Delta^T(g)$
$\overline{\mathcal{R}}(g)r^J_{MK}(\Omega)$	$\Delta(g)$

Tablica 3: Tabela działań grupy obrotów na funkcje w układzie laboratoryjnym i wewnętrznym.

Oznacza to, że mając macierze otrzymane dla bazy kartezjańskiej i korzystając z powyższych zależności, można następująco zapisać operatory rzutowe w układzie wewnętrznym:

$$\overline{P}^{\Gamma} = \tfrac{\dim(\Gamma)}{\mathrm{card}(\overline{G})} \textstyle\sum_{k=1}^{N} \chi_k^{(\Gamma)}(\overline{g})^* \sum_{\overline{g}\in cl_k} \overline{g}, \qquad \overline{g} \in \overline{G}, \tag{229}$$

oraz dla drugiej postaci operatora:

$$\overline{P}^{\Gamma}_{ab} = \frac{\dim(\Gamma)}{\mathrm{card}(\overline{G})} \sum_{\overline{g}\in\overline{G}} \Delta^{\Gamma}_{ab}(\overline{g})^* \overline{g} = \frac{\dim(\Gamma)}{\mathrm{card}(\overline{G})} \sum_{\overline{g}\in\overline{G}} \Delta^{\Gamma}_{ba}(g)^* \overline{g}. \tag{230}$$

Przy powyższym zapisie trzeba pamiętać, że każdemu elementowi $g \in G$ w układzie laboratoryjnym odpowiada dokładnie jeden element $\overline{g} \in \overline{G}$ w układzie wewnętrznym oraz g i $\overline{g}$ oznaczają identyczne obroty, ale względem różnych układów odniesienia.

Poniżej, w tabelach 4 i 5, przedstawione są przykłady dla funkcji rotacyjnych o momencie pędu $J = 1$ i odpowiadające im funkcje w zmiennych kartezjańskich, które transformują się identycznie względem obrotów.

(Z) Dla modelu kolektywnego o zmiennych zespolonych i dla $J = 1$ mamy trójwymiarową reprezentację, dla której zachodzi:

reprezentacja	baza funkcji rotacyjnych	baza kartezjańska
T_1	$\frac{1}{\sqrt{2}}\big(r^1_{M1}(\Omega) - r^1_{M-1}(\Omega)\big)$	S_x
	$\frac{i}{\sqrt{2}}\big(r^1_{M1}(\Omega) + r^1_{M-1}(\Omega)\big)$	S_y
	$-r^1_{M0}(\Omega)$	S_z

Tablica 4: Funkcje bazowe dla reprezentacji T_1 w modelu (Z) przedstawione za pomocą zmiennych kartezjańskich x, y, z oraz kątów Eulera Ω.

gdzie $S_i, i = x, y, z$ jest bazą, transformującą się tak samo jak funkcje bazowe x, y, z. Różnica pomiędzy tymi bazami polega na tym, że $S_i, i = x, y, z$ nie zmieniają znaku przy inwersji, [10, 9].

(R) Dla modelu kolektywnego o zmiennych rzeczywistych mamy jednowymiarową reprezentację A_2 oraz dwuwymiarową E, dla których:

reprezentacja	baza funkcji rotacyjnych	baza kartezjańska
A_2	$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(r^1_{M1}(\Omega) + r^1_{M-1}(\Omega)\right)$	y
E	$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(r^1_{M1}(\Omega) - r^1_{M-1}(\Omega)\right)$	x
	$-r^1_{M0}(\Omega)$	z

Tablica 5: Funkcje bazowe dla reprezentacji A_2 i E w modelu (R) przedstawione za pomocą zmiennych kartezjańskich x, y, z oraz kątów Eulera Ω.

Powyższa baza kartezjańska wygląda inaczej niż w [9, 10]. Wynika to z tego, że w wymienionych artykułach grupa D_4 jest obrócona względem grupy opisanej w [2] skąd brane są macierze reprezentacji. Różnica pomiędzy tymi bazami przedstawiona jest w dodatku C.

6.2.3 Postać stanów używanych do opisu pasm energetycznych

Ogólna postać stanów, które są wykorzystywane do budowy modeli kolektywnych (Z) i (R) otrzymywana jest z zależności przedstawionych w tabeli 3. Sprowadza się to do znalezienia współczynników stojących przy wszystkich możliwych kombinacjach iloczynów funkcji bazowych, które ostatecznie tworzą funkcję niezmienniczą pod działaniem grupy symetryzacji. Są one obliczane przez rzutowanie kombinacji wektorów $|v\rangle$ na odpowiednią podprzestrzeń reprezentacji Γ, a następnie porównane z postacią początkową, tj. szukane kombinacje muszą spełniać równość:

$$\overline{P}^{\Gamma}|v\rangle = |v\rangle, \tag{231}$$

gdzie $\overline{P}^{\Gamma}$ jest operatorem rzutującym na przestrzeń reprezentacji Γ grupy $\overline{G}_s$.

Poniżej przedstawione są reprezentacje jakie zostały otrzymane przy pomocy opisanej procedury.

W modelu (Z), czyli gdy używamy zespolonych zmiennych kolektywnych mamy następujące reprezentacje grupy symetryzacji $\overline{O}$: dwie reprezentacje jednowymiarowe A_1, A_2, jedną dwuwymiarową E oraz dwie reprezentacje trójwymiarowe T_1, T_2, [2].
Dla rozważanych stopni swobody zostały otrzymane następujące wyniki:

(i) wibracje kwadrupolowe opisane są przez funkcje bazowe należące do reprezentacji: A_1, A_2, E,

(ii) wibracje oktupolowe:

  (a) o parzystości dodatniej zostały otrzymane z funkcji należących do: A_1, T_1, T_2,

  (b) o parzystości ujemnej opisane są przez reprezentacje: A_2, T_1, T_2,

(iii) ruch rotacyjny opisany jest przez następujące reprezentacje, do których należą następujące funkcje bazowe:

$J = 0$: A_1

$J = 1$: T_1

$J = 2$: E, T_2

$J = 3$: A_2, T_1, T_2

$J = 4$: A_1, E, T_1, T_2

$J = 5$: E, T_2, oraz dwie równoważne reprezentacje trójwymiarowe T_1, które dla rozróżnienia posiadają dodatkowy indeks $T_{1;i}$, $i = 1, 2$.

W modelu (R), czyli przy wykorzystaniu rzeczywistych zmiennych kolektywnych, mamy następujące reprezentacje grupy symetryzacji $\overline{D}_{4;y}$: cztery reprezentacje jednowymiarowe A_1, A_2, B_1, B_2 oraz jedną dwuwymiarową E, [2]. Funkcje bazowe otrzymane dla tej grupy symetryzacji należą do następujących reprezentacji:

(i) wibracje kwadrupolowe: A_1, B_1,

(ii) wibracje oktupolowe:

  (a) parzystość dodatnia: A_1, A_2, B_1, B_2,

  (b) parzystość ujemna: E,

(iii) ruch rotacyjny:

$J = 0$: A_1,

$J = 1$: A_2, E,

$J = 2$: A_1, B_1, B_2, E,

$J = 3$: B_1, A_2, B_2 oraz dwie równoważne reprezentacje E oznaczone jako $E_{;1}$ i $E_{;2}$,

$J = 4$: B_1, A_2, B_2, dwie równoważne reprezentacje A_1: $A_{1;i}$, $i = 1, 2$ oraz E: $E_{;1}$ i $E_{;2}$,

$J = 5$: A_1, B_1, B_2, dwie równoważne reprezentacje A_2: $A_{2;i}$, $i = 1, 2$, oraz trzy równoważne reprezentacje E: $E_{;1}, E_{;2}$ i $E_{;3}$.

Ponieważ każdy stan musi być opisany przez funkcje niezmiennicze względem grupy symetryzacji $\overline{G}_s$, tworzące go wektory bazowe muszą być tak dobrane, aby ich iloczyn Kroneckera zawierał w sobie reprezentację niezmienniczą A_1 względem grupy $\overline{G}_s$, tzn. musi zachodzić:

$$\Gamma_1 \times \Gamma_2 \times \Gamma_3 \supset A_1. \tag{232}$$

W przeciwnym wypadku otrzymamy wektory zerowe.

W dalszej części, żeby nie pisać całych funkcji opisujących poszczególne stany, będą jedynie przedstawione reprezentacje do jakich należą poszczególne funkcje bazowe, tj. będzie jedynie podana trójka symboli $\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3$, które odnoszą się odpowiednio do oznaczenia reprezentacji do jakiej należy funkcja bazowa: kwadrupolowa Γ_1, oktupolowa Γ_2 oraz rotacyjna Γ_3.

W modelu (Z) mamy następujące iloczyny funkcji bazowych dające funkcje niezmiennicze względem działania grupy symetryzacji $\overline{O}$:

(i) dla pasma kwadrupolowego, posiadającego stany o parzystości dodatniej:

$$\begin{aligned} 0^+: &\quad A_1A_1A_1, \\ 2^+: &\quad A_1T_2T_2, A_2T_1T_2, EA_1E, ET_1T_2, ET_2T_2, \\ 4^+: &\quad A_1A_1A_1, A_1T_1T_1, A_1T_2T_2, A_2T_1T_2, A_2T_2T_1, \\ &\quad EA_1E, ET_1T_1, ET_1T_2, ET_2T_1, ET_2T_2, \end{aligned} \tag{233}$$

(ii) dla pasm oktupolowych, składających się ze stanów o parzystości ujemnej:

– dla pierwszego pasma oktupolowego o nieparzystym momencie pędu:

$$\begin{aligned} 3^-: &\quad A_1A_2A_2, A_1T_1T_1, A_1T_2T_2, A_2T_1T_2, A_2T_2T_1, \\ &\quad ET_1T_1, ET_1T_2, ET_2T_1, ET_2T_2, \\ 5^-: &\quad A_1T_1T_1, A_1T_2T_2, A_2T_1T_2, A_2T_2T_1, EA_2E, \\ &\quad ET_1T_1, ET_1T_2, ET_2T_1, ET_2T_2, \end{aligned} \tag{234}$$

– dla drugiego pasma oktupolowego o parzystym momencie pędu:

$$\begin{aligned} 2^-: &\quad A_1T_2T_2, A_2T_1T_2, EA_2E, ET_1T_2, ET_2T_2, \\ 4^-: &\quad A_1T_1T_1, A_1T_2T_2, A_2A_2A_1, A_2T_1T_2, A_2T_2T_1, \\ &\quad EA_2E, ET_1T_1, ET_1T_2, ET_2T_1, ET_2T_2. \end{aligned} \tag{235}$$

Zatem łącznie mamy 50 możliwości wyboru struktury pasma kwadrupolowego, 81 schematów pasma oktupolowego o nieparzystym momencie pędu oraz 50 dla parzystego momentu pędu. Oznacza to, że wszystkich możliwych schematów, które trzeba by było sprawdzić jest $50^2 \times 81$. Ze względu na tak dużą liczbę otrzymanych możliwości zostały wprowadzone pewne ograniczenia dotyczące funkcji bazowych wynikające z dotychczasowych badań nad strukturą jądra atomowego.

Dla pasma kwadrupolowego zakładamy, że funkcja opisująca część oktupolową jest zerofononowa oraz nie posiada żadnych deformacji statycznych. Takie warunki powodują, że funkcja oktupolowa jest niezmiennicza pod działaniem grupy wewnętrznej $\overline{O}$, czyli należy do reprezentacji $\Gamma_2 = A_1$. Dzięki temu liczba możliwych kwadrupolowych pasm redukuje się do dwóch możliwości przedstawionych w tabeli 6.

stan	Γ_1	Γ_2	Γ_3
0^+	A_1	A_1	A_1
2^+	E	A_1	E

stan	Γ_1	Γ_2	Γ_3
4^+	A_1	A_1	A_1
	E	A_1	E

Tablica 6: Model (Z) – wybór stanów
Model o zmiennych zespolonych – wybór stanów dla pasma kwadrupolowego

Dla pasma oktupolowego warunkiem jest wybór kwadrupolowych funkcji zerofononowych dla których rozważone są dwa przypadki w zależności od wartości kwadrupolowych deformacji statycznych $\mathring{\alpha}_{20}, \ \mathring{\alpha}_{22}$:

(i) Gdy $\mathring{\alpha}_{20}, \ \mathring{\alpha}_{22} = 0$ funkcja kwadrupolowa, podobnie jak funkcja oktupolowa w paśmie kwadrupolowym, należy do reprezentacji $\Gamma_1 = A_1$. Daje to łącznie 6 możliwości wyboru kombinacji stanów opisujących pasmo kwadrupolowe o nieparzystym momencie pędu, oraz 2 dla parzystego momentu pędu, tabela 7.

(ii) W przypadku gdy $\mathring{\alpha}_{20}, \ \mathring{\alpha}_{22} \neq 0$, jeśli nie nakłada się żadnych dodatkowych warunków na każdą z funkcji przedstawionych w tabeli opisującej stany w paśmie oktupolowym, mamy 81 możliwości opisu pasma oktupolowego o nieparzystym momencie pędu oraz 50 o parzystym momencie pędu, stany 234 i 235.

Dla modelu (R) mamy następujące iloczyny funkcji bazowych dające funkcję niezmienniczą względem działania grupy symetryzacji $\overline{D}_{4;y}$:

stan	Γ_1	Γ_2	Γ_3
3^-	A_1	A_2	A_2
	A_1	T_1	T_1
	A_1	T_2	T_2
5^-	A_1	T_1	T_1
	A_1	T_2	T_2

stan	Γ_1	Γ_2	Γ_3
2^-	A_1	T_2	T_2
4^-	A_1	T_1	T_1
	A_1	T_2	T_2

Tablica 7: Model (Z) – wybór stanów dla pasma oktupolowego

(i) Dla pasma kwadrupolowego:

$$\begin{aligned} 0^+: &\quad A_1A_1A_1, B_1B_1A_1, \\ 2^+: &\quad A_1A_1A_1, A_1B_1B_1, A_1B_2B_2, \\ &\quad B_1B_1A_1, B_1A_1B_1, B_1A_2B_2, \\ 4^+ &\quad A_1A_1A_1, A_1A_2A_2, A_1B_1B_1, A_1B_2B_2, \\ &\quad B_1B_1A_1, B_1B_2A_2, B_1A_1B_1, B_1A_2B_2. \end{aligned} \tag{236}$$

Podobnie jak w modelu o zmiennych zespolonych, dla tego pasma nałożone są dodatkowe warunki na oktupolową funkcję wibracyjną. Zakładamy, że ta funkcja nie posiada wzbudzeń oraz deformacji statycznych, zatem należy do reprezentacji $\Gamma_2 = A_1$. Taki wybór powoduje, że mamy dokładnie jeden możliwy opis stanu 0^+, po dwa dla 2^+ i 4^+. Daje to cztery możliwości opisu pasma kwadrupolowego, które przedstawione są w tabeli 8.

stan	Γ_1	Γ_2	Γ_3
0^+	A_1	A_1	A_1
2^+, 4^+	A_1	A_1	A_1
	B_1	A_1	B_1

Tablica 8: Model (R) – wybór stanów dla pasma kwadrupolowego

(ii) Dla pasma oktupolowego o nieparzystym i parzystym momencie pędu stany składają się z funkcji należących do nieprzywiedlnych reprezentacji przedstawionych w tabeli 9.

Dla obu pasm oktupolowych jedynym warunkiem nałożonym na funkcje jest brak wzbudzenia przy wektorze bazowym opisującym kwadrupolową część wibracyjną. Taki wybór funkcji nie zmienia liczby potencjalnych możliwości otrzymanych pasm oktupolowych o nieparzystym i parzystym momencie pędu. W obu przypadkach mamy po cztery możliwości.

stan	Γ_1	Γ_2	Γ_3
3^-, 5^-, 2^-,4^-	A_1	E	E
	B_1	E	E

Tablica 9: Model (R) – wybór stanów dla pasma oktupolowego

Korzystając z powyższych funkcji łącznie można utworzyć 16 modeli dla pasma kwadrupolowego oraz oktupolowego o nieparzystym momencie pędu. Dodatkowo dla każdego wyboru dwóch pierwszych pasm można utworzyć cztery schematy trzeciego pasma, oktupolowego o parzystych momentach pędu, co daje razem 64 możliwości różnych wyborów stanów.

Chcąc otrzymać dokładniejsze schematy stanów używanych do opisu pasm energetycznych można wykorzystać analogie struktur algebraicznych otrzymanych w układzie laboratoryjnym i wewnętrznym. Postępowanie to pozwala uprościć wykonywane obliczenia w układzie wewnętrznym, gdzie postać funkcji bazowych jest bardziej skomplikowana niż w układzie laboratoryjnym.

Dla przykładu przyjmijmy, że w układzie laboratoryjnym mamy funkcje bazowe v_1, v_2, v_1', v_1'', v_2'' należące odpowiednio do następujących reprezentacji: dwuwymiarowej Γ_1, jednowymiarowej Γ_2, dwuwymiarowej Γ_3 grupy G. Następnie tworzymy kombinacje liniowe $\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{2} a_{ij}v_iv_1'v_j''$, które rzutujemy na reprezentację symetryczną grupy G. Ponieważ chcemy mieć niezmienniczą kombinację liniową naszych wektorów, zatem po użyciu operatora rzutowego powinniśmy mieć identyczną kombinację jak początkowa. Porównując postacie kombinacji otrzymujemy układ równań na współczynniki a_{ij}. Znając je wystarczy unormować otrzymany wektor.

Dla naszego przykładu załóżmy, że niezmiennicza kombinacja liniowa wektorów w układzie laboratoryjnym ma postać:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\{v_1v_1'v_2'' - v_2v_1'v_1''\}. \tag{237}$$

Wiedząc, że grupa G jak i odpowiadająca jej grupa wewnętrzna $\overline{G}$ są antyizomorficzne, zatem każdemu elementowi $g \in G$ odpowiada dokładnie jeden $\overline{g} \in \overline{G}$, co pozwala przenieść własności transformacyjne na grupę wewnętrzną. Zatem dla rozważanego przykładu możemy znaleźć dla odpowiednich reprezentacji: dwuwymiarowej Γ_1, jednowymiarowej Γ_2, dwuwymiarowej Γ_3 grupy $\overline{G}$ wektory bazowe transformujące się tak samo jak funkcje bazowe w układzie laboratoryjnym. Mając wektory bazowe $\psi^{\Gamma_1}_{vib2;1}$, $\psi^{\Gamma_1}_{vib2;2}$, $\psi^{\Gamma_2}_{vib3;1}$ oraz $R^{JM}_{\Gamma_3;1}$, $R^{JM}_{\Gamma_3;2}$, które transformują się identycznie jak odpowiednie funkcje v_1, v_2, v_1' i v_1'', v_2'' możemy utworzyć kombinację liniową niezmienniczą względem działania grupy wewnętrznej $\overline{G}$, która ma dokładnie taką samą

postać jak (237):

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi^{\Gamma_1}_{vib2;1}\psi^{\Gamma_2}_{vib3;1}R^{JM}_{\Gamma_3;2}-\psi^{\Gamma_1}_{vib2;2}\psi^{\Gamma_2}_{vib3;1}R^{JM}_{\Gamma_3;1}\}. \qquad (238)$$

Ponieważ podczas konstrukcji wektorów bazowych w układzie wewnętrznym możemy od razu podać ich odpowiedniki w układzie laboratoryjnym, dla uproszczenia zapisu będziemy je oznaczać indeksem dolnym przedstawiającym odpowiadający im kartezjański wektor bazowy. Dla naszego przykładu (238) niezmiennicza kombinacja liniowa ma wówczas postać:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi^{\Gamma_1}_{vib2;v_1}\psi^{\Gamma_2}_{vib3;v'_1}R^{JM}_{\Gamma_3;v''_2}-\psi^{\Gamma_1}_{vib2;v_2}\psi^{\Gamma_2}_{vib3;v'_1}R^{JM}_{\Gamma_3;v''_1}\}. \qquad (239)$$

Pełna konstrukcja uzyskanych stanów dla opisywanych modeli zostanie dokładnie przedstawione na końcu tego rozdziału, po opisaniu pełnego schematu.

6.2.4 Charakterystyka funkcji bazowych

Zgodnie z przyjętą metodologią funkcje bazowe opisujące stany powinny spełniać żądane warunki. Chcąc je uzyskać trzeba zbudować tzw. funkcje początkowe posiadające potrzebne cechy, a następnie zrzutować je na nieprzywiedlne reprezentacje grupy symetryzacji $\overline{G}_s$.

Zatem pierwszym krokiem jest wybór funkcji początkowych, które posiadają odpowiednie cechy charakteryzujące przestrzenie opisujące ruchy wibracyjny oraz rotacyjny. Z przyczyn praktycznych nie jest rozpatrywana pełna baza dla przestrzeni $\mathcal{K}$, a jedynie jej mały fragment. Naszy celem było otrzymanie zero i jednofononowych funkcji wibracyjnych. W części rotacyjnej wykorzystujemy pełną przestrzeń stanów. Jedynym ograniczeniem w opisie ruchu rotacyjnego (ze względów obliczeniowych) jest zakres momentów pędu $J = 0, 1, 2, 3, 4, 5$. Jak było wcześniej wspomniane część rotacyjna stanów przynależy do podprzestrzeni nieprzywiedlnych reprezentacji grupy $\overline{D}_2 \subset \overline{G}_s = \overline{O}, \overline{D}_{4;y}$, która jest grupą symetrii typowego hamiltonianu rotora trójosiowego.

Należy zauważyć, że uzyskane funkcje po zrzutowaniu na podprzestrzenie $P^{\Gamma}_{pp}\mathcal{K} = \mathcal{K}^{\Gamma}_{pp}$ odpowiadające danej reprezentacji grupy symetryzacji nie zawsze są ortogonalne. Zgodnie z tym co zostało przedstawione powyżej chcąc pracować na przestrzeniach ortogonalnych powinniśmy otrzymane funkcje zortogonalizować. Niestety operatory rzutowe, zarówno dla grupy $\overline{O}$ jak i $\overline{D}_{4;y}$, dają w wyniku bardzo rozbudowane funkcje. Chcąc je zortogonalizować, np. metodą Gramma-Schmita, otrzymalibyśmy coraz bardziej skomplikowane ich kształty. W praktyce okazuje się, że w tym przypadku lepiej

jest pracować z funkcjami nieortogonalnymi. Wymaga to jednak szczególnej uwagi, ze względu na niezerowe iloczyny skalarne pomiędzy takimi wektorami bazowymi.

Pierwszym krokiem konstrukcji funkcji bazowych jest wybór funkcji początkowych, z których są otrzymywane funkcje bazowe dla nieprzywiedlnych reprezentacji grupy symetryzacji $\overline{G}_s = \overline{O}, \overline{D}_{4;y}$.

Dodatkowo istotną cechą funkcji bazowych jest również odpowiednia parzystość. Można ją otrzymać korzystając z operatora inwersji przestrzennej $\hat{I}$. Wówczas funkcja o parzystości dodatniej jest zdefiniowana następującą równością:

$$\hat{I} f(\alpha_{\lambda\mu}) = f(\alpha_{\lambda\mu}), \tag{240}$$

a funkcja o parzystości ujemnej:

$$\hat{I} f(\alpha_{\lambda\mu}) = -f(\alpha_{\lambda\mu}), \tag{241}$$

gdzie wykorzystywana jest definicja działania operatora $\hat{I}$ na $\alpha_{\lambda\mu}$:

$$\hat{I} \alpha_{\lambda\mu} = (-1)^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}. \tag{242}$$

Gdy chcemy otrzymać funkcję o parzystości dodatniej z dowolnej funkcji $f(\alpha_{\lambda\mu})$ wystarczy podziałać operatorem rzutowym postaci $\frac{1}{2}(\hat{\mathbb{1}} + \hat{I})$:

$$\frac{1}{2}(\hat{\mathbb{1}} + \hat{I}) f(\alpha_{\lambda\mu}) = \frac{1}{2}\big(f(\alpha_{\lambda\mu}) + f(\hat{I}\alpha_{\lambda\mu})\big). \tag{243}$$

Analogicznie uzyskujemy funkcję o parzystości ujemnej przez działanie operatora rzutowego postaci $\frac{1}{2}(\hat{\mathbb{1}} - \hat{I})$:

$$\frac{1}{2}(\hat{\mathbb{1}} - \hat{I}) f(\alpha_{\lambda\mu}) = \frac{1}{2}\big(f(\alpha_{\lambda\mu}) - f(\hat{I}\alpha_{\lambda\mu})\big). \tag{244}$$

Ponieważ powyższe operatory komutują z operatorami rzutowania na nieprzywiedlne reprezentacje grup przestrzennych, zatem nie jest istotna kolejność ich działania na funkcje początkowe.

Ze względu na to, że po zrzutowaniu na niezmienniczą podprzestrzeń grupy symetryzacji, funkcje początkowe przyjmują bardziej skomplikowaną postać, najwygodniej jest najpierw zrzutować funkcję początkową na żądaną parzystość, a następnie tak otrzymaną nową funkcję zrzutować na odpowiednie nieprzywiedlne reprezentacje grupy symetryzacji.

W przedstawionych modelach kolektywnych jedynym pasmem ze stanami o parzystości dodatniej jest pasmo kwadrupolowe. Pozostałe dwa pasma oktupolowe mają stany o parzystości ujemnej.

W przypadku dowolnej funkcji kwadrupolowej $f(\alpha_{2\mu})$ działanie operatorem inwesji $\hat{I}$ nie powoduje żadnej zmiany w postaci funkcji:

$$\hat{I}f(\alpha_{2\mu}) = f(\hat{I}\alpha_{2\mu}) = f(\alpha_{2\mu}), \tag{245}$$

czyli są to funkcje o parzystości dodatniej. Działanie inwersji, (242), na zmienne oktupolowe $\{\alpha_{3\mu}\}$ prowadzi natomiast w funkcjach oktupolowych do zmiany znaku ich argumentów:

$$\hat{I}f(\alpha_{3\mu}) = f(\hat{I}\alpha_{3\mu}) = f(-\alpha_{3\mu}). \tag{246}$$

Należy dodać, że kąty Eulera Ω są niezmiennicze względem działania $\hat{I}$, co oznacza, że wszystkie funkcje rotacyjne mają parzystość dodatnią.

Konstrukcja funkcji bazowych w modelu o zmiennych zespolonych. W przypadku wyboru zespolonych zmiennych $\alpha_{\lambda\mu}$, $\lambda = 2, 3$ zostały stworzone dwa rodzaje baz:

(i) Pierwsza baza zbudowana jest jedynie z liniowych kombinacji zmiennych kolektywnych. Jest ona otrzymywana przez zrzutowanie kombinacji liniowych zmiennych kwadrupolowych oraz oktupolowych na poszczególne reprezentacje grupy $\overline{O}$.

Zmienne kwadrupolowe α_{20} i α_{22} tworzą bazę dla dwuwymiarowej reprezentacji E. Wykorzystanie zmiennych biegunowych $\alpha_{20} = \beta\cos\gamma, \alpha_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}}\beta\sin\gamma$ pozwala skonstruować szczególnie proste bazy nieprzywiedlnych reprezentacji grupy symetryzacji $\overline{O}$. Ułatwieniem jest fakt, że zmienna $\beta_2^2 = \alpha_{20}^2 + 2\alpha_{22}^2$ jest niezmiennikiem obrotów.

Korzystając z operatora rzutowego zbudowanego z charakterów grupy $\overline{O}$ otrzymamy następujące funkcje bazowe dla reprezentacji A_1, A_2, E:

(a) baza dla reprezentacji jednowymiarowej A_1:

$$u_k^{A_1}(\gamma) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos(3k\gamma), \quad k \in \mathbb{N}_0, \tag{247}$$

(b) baza dla reprezentacji jednowymiarowej A_2:

$$u_k^{A_2}(\gamma) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin(3k\gamma), \quad k \in \mathbb{N}, \tag{248}$$

(c) bazy dla dwóch równoważnych reprezentacji dwuwymiarowych:

– $E_{;1}$:

$$\begin{aligned} u_{k;1}^{E;1}(\gamma) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos\left((3k+1)\gamma\right), \quad k \in \mathbb{N}_0, \\ u_{k;2}^{E;1}(\gamma) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin\left((3k+1)\gamma\right), \quad k \in \mathbb{N}_0, \end{aligned} \tag{249}$$

– $E_{;2}$:

$$\begin{aligned} u_{k;1}^{E;2}(\gamma) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos\left((3k+2)\gamma\right), \quad k \in \mathbb{N}_0, \\ u_{k;2}^{E;2}(\gamma) &= -\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin\left((3k+2)\gamma\right), \quad k \in \mathbb{N}_0. \end{aligned} \tag{250}$$

Zbiory $\mathbb{N}$ i $\mathbb{N}_0$ oznaczają odpowiednio liczby naturalne bez zera oraz z zerem. Powyższe bazy, są wynikiem rzutowania funkcji postaci $\exp(ik\gamma)$.

Baza otrzymana dla reprezentacji dwuwymiarowej $E_{;1}$, dla $k = 0$, transformuje się identycznie jak baza reprezentowana przez zmienne α_{20} i α_{22}. Pozostałe otrzymane funkcje bazowe dla $k \neq 0$ można przedstawić jako kombinacje potęg funkcji $\sin\gamma, \cos\gamma$, co odpowiada odpowiednim kombinacjom iloczynów α_{20} i α_{22}.

Dla trójwymiarowych reprezentacji T_1, T_2 rzut funkcji początkowej $\exp(ik\gamma)$ daje zero, co oznacza, że te reprezentacje nie istnieją w rozważanej przestrzeni funkcji.

Zmienne oktupolowe należą do następujących reprezentacji:

(a) zmienna α''_{32} jest bazą dla jednowymiarowej reprezentacji A_2,

(b) bazą dla trójwymiarowej reprezentacji T_1 są następujące kombinacje: α_{30}, $-\sqrt{3}\alpha'_{31} + \sqrt{5}\alpha'_{33}$ oraz $\sqrt{3}\alpha''_{31} + \sqrt{5}\alpha''_{33}$,

(c) bazą dla trójwymiarowej reprezentacji T_2 są α'_{32}, $\sqrt{5}\alpha'_{31} + \sqrt{3}\alpha'_{33}$ oraz $-\sqrt{5}\alpha''_{31} + \sqrt{3}\alpha''_{33}$.

Dzięki takiej budowie można przewidzieć postać bardziej złożonych wektorów bazowych, np. zbudowanych z jednofononowych funkcji oscylatora harmonicznego.

(ii) Druga otrzymana baza posiada bardziej skomplikowaną postać i jest użyta do budowy stanów w modelu (Z). Poszczególne funkcje bazowe otrzymywane są z następujących funkcji początkowych:

Funkcje kwadrupolowe pochodzą z działania operatora rzutowego na funkcje:

$$
\begin{aligned}
&u_0(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20}) u_0(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22}),\\
&u_0(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20}) u_1(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22}),\\
&u_1(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20}) u_0(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22}),
\end{aligned} \tag{251}
$$

gdzie $u_n(\eta, x) = \sqrt{\frac{\eta}{\sqrt{\pi}2^n n!}} \exp(-\frac{1}{2}\eta^2 x^2) H_n(\eta x)$, a $H_n(\eta x)$ jest wielomianem Hermite'a, [79]. Powyższe oznaczenie funkcji oscylatora harmonicznego będzie używane w dalszej części pracy.

Funkcje oktupolowe zostały otrzymane analogicznie jak to zostało zrobione dla grupy T_d, [69]. Funkcjami początkowymi w konstrukcji naszej bazy nieprzywiedlnych reprezentacji grupy $\overline{O}$ są kombinacje liniowe następujących iloczynów funkcji własnych oscylatora harmonicznego:

$$
\begin{gathered}
u_{n_1}(\eta_3; \alpha_{30}) u_{n_2}(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{31}) u_{n_3}(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{32}) u_{n_4}(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{33})\\
\times u_{n_5}(\sqrt{2}\eta_3; \alpha''_{31}) u_{n_6}(\sqrt{2}\eta_3; \alpha''_{32} \pm \mathring{\alpha}''_{32}) u_{n_7}(\sqrt{2}\eta_3; \alpha''_{33}),\\
n_i = 0, 1,\ i = 1, 2, \cdots, 7,\\
\textstyle\sum_i n_i = 1.
\end{gathered} \tag{252}
$$

Jak widać w (252) zachowany jest warunek, że każdy iloczyn funkcji jest jednofononowy.

Dla zmiennych oktupolowych można otrzymać zarówno funkcje o parzystości dodatniej jak i ujemnej. Używane przez nas funkcje oktupolowe mają parzystość ujemną i należą do tych samych reprezentacji, które zostały otrzymane dla zmiennych oktupolowych. Oznacza to, że funkcja posiadająca wzbudzenie przy zmiennej α''_{32} odpowiedzialnej za deformację tetraedralną związana jest z reprezentacją A_2, dla wzbudzeń o symetrii osiowej α_{30} oraz kombinacji wzbudzeń odpowiadających wektorom $-\sqrt{3}\alpha'_{31} + \sqrt{5}\alpha'_{33}$ oraz $\sqrt{3}\alpha''_{31} + \sqrt{5}\alpha''_{33}$ do T_1, dla wzbudzeń odpowiadającym wektorom α'_{32}, $\sqrt{5}\alpha'_{31} + \sqrt{3}\alpha'_{33}$ oraz $-\sqrt{5}\alpha''_{31} + \sqrt{3}\alpha''_{33}$ do reprezentacji T_2.

W przypadku parzystości dodatniej funkcja posiadająca wzbudzenie przy α''_{32} należy do reprezentacji A_1, dla wzbudzeń przy α_{30}, $-\sqrt{3}\alpha'_{31} + \sqrt{5}\alpha'_{33}$ oraz $\sqrt{3}\alpha''_{31} + \sqrt{5}\alpha''_{33}$ do T_2, dla wzbudzeń odpowiadającym wektorom α'_{32}, $\sqrt{5}\alpha'_{31} + \sqrt{3}\alpha'_{33}$ oraz $-\sqrt{5}\alpha''_{31} + \sqrt{3}\alpha''_{33}$ do T_1. Zmiana parzystości spowodowała, że funkcje bazowe posiadające te same kombinacje wzbudzeń należą do innych reprezentacji: dla jednowymiarowych nastąpiło przejście pomiędzy repre-

zentacjami A_2 i A_1, a w przypadku trójwymiarowych nastąpiła ich zamiana, tj. $T_1 \to T_2$ oraz $T_2 \to T_1$.

Funkcje rotacyjne są uzyskane przez zrzutowanie na nieprzywiedlne reprezentacje $\overline{G}_s$ kombinacji liniowych sprzężonych funkcji Wignera $D^J_{KM}(\Omega)^*$, gdzie J określa moment pędu stanu.

Do uzyskania końcowej postaci każdego stanu, korzystając z macierzy reprezentacji z [2], zostały znalezione współczynniki stojące przy iloczynach Kroneckera, tak aby otrzymana kombinacja liniowa iloczynów trzech wektorów bazowych była niezmiennicza względem grupy symetryzacji $\overline{O}$. Schemat postępowania został przedstawiony wcześniej.

Pełna postać funkcji bazowych znajduje się w dodatku B.

Konstrukcja funkcji bazowych w modelu o zmiennych rzeczywistych. W dalszej części pracy w modelu o zmiennych rzeczywistych (R) zamiast $\widetilde{\alpha}_{3\mu}$ używane są oznaczenia stosowane w modelu (Z) do opisu części rzeczywistych $\alpha'_{3\mu} = \frac{1}{2}\big(\alpha_{3\mu} + \alpha^*_{3\mu}\big)$.

W przypadku modelu (R) opisanym przez zmienne rzeczywiste budowa funkcji bazowych opiera się na przyjęciu odpowiednich początkowych funkcji, które są zrzutowane na reprezentacje grupy symetryzacji $\overline{D}_{4;y}$. Zgodnie z przyjętymi założeniami mamy następujące funkcje początkowe, z których konstruujemy wektory bazowe:

Dla pasma kwadrupolowego mamy:

(i) W części kwadrupolowej składają się one z iloczynów dwóch funkcji zdeformowanego jednowymiarowego oscylatora harmonicznego:

$$\begin{aligned} &u_0(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20})u_0(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22}),\\ &u_0(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20})u_1(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22}),\\ &u_1(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20})u_0(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22}). \end{aligned} \tag{253}$$

Ponieważ wybór zmiennych kwadrupolowych związany jest z określeniem układu wewnętrznego, który w obu omawianych modelach (Z) i (R) jest taki sam, zatem funkcje początkowe mają taką samą postać, natomiast postać końcowa funkcji bazowych jest inna z powodu różnych grup symetryzacji.

(ii) W części oktupolowej nie wprowadzamy deformacji statycznych oraz wzbudzeń, zatem funkcja początkowa ma postać:

$$u_0\big(\eta_3; \alpha_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{32}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{33}\big). \tag{254}$$

Ze względu na brak deformacji statycznych, (254) należy do reprezentacji A_1 odpowiedniej grupy symetryzacji.

(iii) W części rotacyjnej funkcje bazowe uzyskiwane są przez zrzutowanie na nieprzywiedlne reprezentacje grupy symetryzacji kombinacji liniowych sprzężonych funkcji Wignera $D^J_{KM}(\Omega)^*$, gdzie J określa moment pędu stanu dla którego wektory bazowe są szukane.

Dla dwóch pasm oktupolowych, pierwszym o nieparzystych momentach pędu oraz drugim o parzystych momentach pędu, postulujemy następujące funkcje początkowe:

(i) W część kwadrupolowej, dla obu modeli, składają się one z iloczynów dwóch stanów podstawowych zdeformowanego jednowymiarowego oscylatora harmonicznego:

$$u_0(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20})u_0(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22}). \qquad (255)$$

(ii) W części oktupolowej funkcje bazowe opisane są przez iloczyny czterech funkcji oscylatora harmonicznego, gdzie trzy z nich są zerofononowe, a tylko jedna jest jednofononowa:

$$\begin{aligned} &u_{n_0}\big(\eta_3; \alpha'_{30} - \mathring{\alpha}'_{30}\big)u_{n_1}\big(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big) \\ \times &u_{n_2}\big(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big)u_{n_3}\big(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big), \end{aligned} \qquad (256)$$

gdzie $n_i = 0, 1,\ i = 1, 2, 3, 4$ oraz $\sum_i n_i = 1$.

(iii) W części rotacyjnej funkcje bazowe uzyskiwane są przez zrzutowanie na nieprzywiedlne reprezentacje grupy symetryzacji kombinacji liniowych sprzężonych funkcji Wignera $D^J_{KM}(\Omega)^*$, gdzie J określa moment pędu stanu.

Ciekawą własnością operatora rzutowego w przestrzeni rzeczywistych zmiennych kolektywnych jest to, że grupa symetryzacji $\overline{D}_{4;y}$ działając na te zmienne powoduje utworzenie funkcji o dobrze określonej parzystości, mimo, że początkowe funkcje jej nie posiadały. Pozwala to na uproszczenie obliczeń, tj. pominięcie operatora parzystości podczas konstruowania odpowiednich funkcji początkowych. Dokładny opis działania grupy $\overline{D}_{4;y}$ na zmienne $\alpha_{\lambda\mu},\ \lambda = 2, 3$ podany jest w dodatku C.

Postać funkcji bazowych otrzymanych w modelu (Z) i (R). Mając funkcje bazowe, posiadające określoną parzystość można utworzyć odpowiednie iloczyny funkcji bazowych, tak aby dawały wektor niezmienniczy względem obrotów grup symetryzacji $\overline{G}_s = \overline{O}, \overline{D}_{4;y}$. Zgodnie z wcześniejszymi rozważaniami do dyspozycji mamy iloczyn trzech wektorów bazowych należących odpowiednio do reprezentacji $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3$. Jak zostało to wcześniej opisane, postać przedstawionych powyżej funkcji jest równoważna wynikowi otrzymanemu dla analogicznych iloczynów funkcji bazowych grupy laboratoryjnej $G = O, D_{4;y}$ zależnych od zmiennych kartezjańskich. Ponieważ macierze reprezentacji dla funkcji bazowych w układzie wewnętrznym są identyczne jak dla kartezjańskich wektorów bazowych, dlatego dla uproszczenia zostały znalezione kombinacje liniowe trzech funkcji odpowiadających wektorom bazowym w układzie laboratoryjnym.

Poniżej przedstawiony jest opis funkcji wchodzących do konstrukcji stanów w rozważnych dwóch modelach kolektywnych.

Dla modelu (Z), o zespolonych zmiennych oktupolowych, grupą symetryzacji jest $\overline{O}$. Zgodnie z wcześniejszym opisem przyjmujemy następujące oznaczenia:
$\psi^{\Gamma_1}_{vib2;u}$ - funkcja kwadrupolowa należąca do reprezentacji Γ_1 grupy $\overline{O}$, transformująca się identycznie jak wektor bazowy $u(x, y, z)$ reprezentacji Γ_1,
$\psi^{p;\Gamma_2}_{vib3;v}$ - funkcja oktupolowa o parzystości $p = (+)$ dodatniej ($p = (-)$ ujemnej) transformująca się jak wektor bazowy $v(x, y, z)$ reprezentacji Γ_2,
$R^{JM}_{\Gamma_3;w}$ - funkcja rotacyjna należąca do reprezentacji Γ_3 i transformująca się identycznie jak wektor bazowy $w(x, y, z)$ reprezentacji Γ_3.
Ponieważ reprezentacje równoważne posiadają identyczne wektory bazowe, dlatego w podanych poniżej wzorach pomijane są indeksy, które je rozróżniają.

Uzyskane podczas obliczeń unormowane i zsymetryzowane funkcje opisujące stan o momencie pędu $0 \leq J \leq 5$ mają postać:

1. $\Gamma_1 = A_1, \Gamma_2 = A_1, \Gamma_3 = A_1$

$$\psi^{A_1}_{vib2;x^2+y^2+z^2}\psi^{p;A_1}_{vib3;x^2+y^2+z^2}R^{JM}_{A_1;x^2+y^2+z^2}. \tag{257}$$

Funkcja ta może być użyta do opisu stanu o parzystości dodatniej ($p = (+)$) posiadającej moment pędu $J = 0, 4$.

2. $\Gamma_1 = A_1, \Gamma_2 = A_2, \Gamma_3 = A_2$

$$\psi^{A_1}_{vib2;x^2+y^2+z^2}\psi^{p;A_2}_{vib3;xyz}R^{JM}_{A_2;xyz}. \tag{258}$$

Funkcja ta może być użyta do opisu stanu o parzystości ujemnej $(p = (-))$ o momencie pędu $J = 3$.

3. $\Gamma_1 = A_2, \Gamma_2 = A_1, \Gamma_3 = A_2$

$$\psi^{A_2}_{vib2;xyz}\psi^{p;A_1}_{vib3;x^2+y^2+z^2}R^{JM}_{A_2;xyz}. \quad (259)$$

Funkcja ta może być użyta do opisu stanu o parzystości dodatniej $(p = (+))$ o momencie pędu $J = 3$. Ponieważ w naszym modelu kolektywnym nie pojawia się stan 3^+, zatem stan ten nie jest wykorzystywany do obliczeń.

4. $\Gamma_1 = A_2, \Gamma_2 = A_2, \Gamma_3 = A_1$

$$\psi^{A_2}_{vib2;xyz}\psi^{p;A_2}_{vib3;xyz}R^{JM}_{A_1;x^2+y^2+z^2}. \quad (260)$$

Funkcja ta może być użyta do opisu stanu o parzystości ujemnej $(p = (-))$ o momencie pędu $J = 0, 4$. Ponieważ w modelu kolektywnym nie pojawia się stan 0^-, zatem nie jest on wykorzystywany do obliczeń.

5. $\Gamma_1 = A_1, \Gamma_2 = T_1, \Gamma_3 = T_1$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(\psi^{A_1}_{vib2;x^2+y^2+z^2}\psi^{p;T_1}_{vib3;x}R^{JM}_{T_1;x} + \psi^{A_1}_{vib2;x^2+y^2+z^2}\psi^{p;T_1}_{vib3;y}R^{JM}_{T_1;y} + \psi^{A_1}_{vib2;x^2+y^2+z^2}\psi^{p;T_1}_{vib3;z}R^{JM}_{T_1;z}. \quad (261)$$

Funkcja ta może być użyta do opisu stanu o parzystości dodatniej i ujemnej $(p = (\pm))$ oraz momencie pędu $J = 1, 3, 4, 5$. Ponieważ w naszych obliczeniach nie pojawiają się stany $1^+, 3^+, 5^+$, zatem nie są one wykorzystywane w dalszej cześci pracy.

6. $\Gamma_1 = A_1, \Gamma_2 = T_2, \Gamma_3 = T_2$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(\psi^{A_1}_{vib2;x^2+y^2+z^2}\psi^{p;T_2}_{vib3;xy}R^{JM}_{T_2;xy} + \psi^{A_1}_{vib2;x^2+y^2+z^2}\psi^{p;T_2}_{vib3;yz}R^{JM}_{T_2;yz} + \psi^{A_1}_{vib2;x^2+y^2+z^2}\psi^{p;T_2}_{vib3;xz}R^{JM}_{T_2;xz}. \quad (262)$$

Funkcja ta może być użyta do opisu stanu o parzystości dodatniej i ujemnej $(p = (\pm))$ o momencie pędu $J = 2, 3, 4, 5$. Ponieważ w obliczeniach nie pojawiają się stany $3^+, 5^+$, zatem nie są one dalej wykorzystywane.

7. $\Gamma_1 = A_2, \Gamma_2 = T_1, \Gamma_3 = T_2$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(\psi^{A_2}_{vib2;xyz}\psi^{p;T_1}_{vib3;x}R^{JM}_{T_2;yz} + \psi^{A_2}_{vib2;xyz}\psi^{p;T_1}_{vib3;y}R^{JM}_{T_2;xz} + \psi^{A_2}_{vib2;xyz}\psi^{p;T_1}_{vib3;z}R^{JM}_{T_2;xy}. \quad (263)$$

Funkcja ta może być użyta do opisu stanu o parzystości dodatniej i ujemnej ($p = (\pm)$) o momencie pędu $J = 2, 3, 4, 5$. Ponieważ w obliczeniach nie pojawiają się stany $3^+, 5^+$, zatem nie są one wykorzystywane.

8. $\Gamma_1 = A_2, \Gamma_2 = T_2, \Gamma_3 = T_1$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(\psi^{A_2}_{vib2;xyz}\psi^{p;T_2}_{vib3;yz}R^{JM}_{T_1;x} + \psi^{A_2}_{vib2;xyz}\psi^{p;T_2}_{vib3;xz}R^{JM}_{T_1;y} + \psi^{A_2}_{vib2;xyz}\psi^{p;T_2}_{vib3;xy}R^{JM}_{T_1;z}. \qquad (264)$$

Funkcja ta może być użyta do opisu stanu o parzystości dodatniej i ujemnej ($p = (\pm)$) o momencie pędu $J = 1, 3, 4, 5$. Ponieważ w obliczeniach nie pojawiają się stany $1^+, 1^-, 3^+, 5^+$, zatem nie są one wykorzystywane.

9. $\Gamma_1 = E, \Gamma_2 = A_1, \Gamma_3 = E$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi^{E}_{vib2;\sqrt{3}(x^2-y^2)}\psi^{p;A_1}_{vib3;x^2+y^2+z^2}R^{JM}_{E;\sqrt{3}(x^2-y^2)} + \psi^{E}_{vib2;2z^2-x^2-y^2}\psi^{p;A_1}_{vib3;x^2+y^2+z^2}R^{JM}_{E;2z^2-x^2-y^2}). \qquad (265)$$

Funkcja ta może być użyta do opisu stanu o parzystości dodatniej ($p = (+)$) o momencie pędu $J = 2, 4, 5$. Ponieważ w obliczeniach nie pojawia się stan 5^+, zatem nie jest on wykorzystywany w dalszych obliczeniach.

10. $\Gamma_1 = E, \Gamma_2 = A_2, \Gamma_3 = E$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi^{E}_{vib2;\sqrt{3}(x^2-y^2)}\psi^{p;A_2}_{vib3;xyz}R^{JM}_{E;2z^2-x^2-y^2} - \psi^{E}_{vib2;2z^2-x^2-y^2}\psi^{p;A_2}_{vib3;xyz}R^{JM}_{E;\sqrt{3}(x^2-y^2)}). \qquad (266)$$

Funkcja ta może być użyta do opisu stanu o parzystości ujemnej ($p = (-)$) o momencie pędu $J = 2, 4, 5$. Ponieważ w obliczeniach nie pojawia się stan 5^+, zatem nie jest on wykorzystywany w dalszej części pracy.

11. $\Gamma_1 = E, \Gamma_2 = T_1, \Gamma_3 = T_1$

$$\frac{1}{2}\psi^{E}_{vib2;\sqrt{3}(x^2-y^2)}\psi^{p;T_1}_{vib3;x}R^{JM}_{T_1;x} - \frac{1}{2}\psi^{E}_{vib2;\sqrt{3}(x^2-y^2)}\psi^{p;T_1}_{vib3;y}R^{JM}_{T_1;y} - \frac{\sqrt{3}}{6}\psi^{E}_{vib2;2z^2-x^2-y^2}\psi^{p;T_1}_{vib3;x}R^{JM}_{T_1;x} - \frac{\sqrt{3}}{6}\psi^{E}_{vib2;2z^2-x^2-y^2}\psi^{p;T_1}_{vib3;y}R^{JM}_{T_1;y} + \frac{\sqrt{3}}{3}\psi^{E}_{vib2;2z^2-x^2-y^2}\psi^{p;T_1}_{vib3;z}R^{JM}_{T_1;z}. \qquad (267)$$

Funkcja ta może być użyta do opisu stanu o parzystości dodatniej i ujemnej ($p = (\pm)$) o momencie pędu $J = 1, 3, 4, 5$. Ponieważ w obliczeniach nie pojawiają się stany $1^+, 1^-, 3^+, 5^+$, zatem nie są one wykorzystywane.

12. $\Gamma_1 = E, \Gamma_2 = T_2, \Gamma_3 = T_2$

$$\frac{1}{2}\psi^{E}_{vib2;\sqrt{3}(x^2-y^2)}\psi^{p;T_2}_{vib3;yz}R^{JM}_{T_2;yz} - \frac{1}{2}\psi^{E}_{vib2;\sqrt{3}(x^2-y^2)}\psi^{p;T_2}_{vib3;xz}R^{JM}_{T_2;xz}$$
$$-\frac{\sqrt{3}}{6}\psi^{E}_{vib2;2z^2-x^2-y^2}\psi^{p;T_2}_{vib3;yz}R^{JM}_{T_2;yz} - \frac{\sqrt{3}}{6}\psi^{E}_{vib2;2z^2-x^2-y^2}\psi^{p;T_2}_{vib3;xz}R^{JM}_{T_2;xz}$$
$$+\frac{\sqrt{3}}{3}\psi^{E}_{vib2;2z^2-x^2-y^2}\psi^{p;T_2}_{vib3;xy}R^{JM}_{T_2;xy}. \tag{268}$$

Funkcja ta może być użyta do opisu stanu o parzystości dodatniej i ujemnej ($p = (\pm)$) o momencie pędu $J = 2, 3, 4, 5$. Ponieważ w obliczeniach nie pojawiają się stany $3^+, 5^+$, zatem nie są one wykorzystywane.

13. $\Gamma_1 = E, \Gamma_2 = T_1, \Gamma_3 = T_2$

$$\frac{\sqrt{3}}{6}\psi^{E}_{vib2;\sqrt{3}(x^2-y^2)}\psi^{p;T_1}_{vib3;x}R^{JM}_{T_2;yz} + \frac{\sqrt{3}}{6}\psi^{E}_{vib2;\sqrt{3}(x^2-y^2)}\psi^{p;T_1}_{vib3;y}R^{JM}_{T_2;xz}$$
$$-\frac{\sqrt{3}}{3}\psi^{E}_{vib2;\sqrt{3}(x^2-y^2)}\psi^{p;T_1}_{vib3;z}R^{JM}_{T_2;xy} \tag{269}$$
$$+\frac{1}{2}\psi^{E}_{vib2;2z^2-x^2-y^2}\psi^{p;T_1}_{vib3;x}R^{JM}_{T_2;yz} - \frac{1}{2}\psi^{E}_{vib2;2z^2-x^2-y^2}\psi^{p;T_1}_{vib3;y}R^{JM}_{T_2;xz}.$$

Funkcja ta może być użyta do opisu stanu o parzystości dodatniej i ujemnej ($p = (\pm)$) o momencie pędu $J = 2, 3, 4, 5$. Ponieważ w obliczeniach nie pojawiają się stany $3^+, 5^+$, zatem nie są one dalej wykorzystywane.

14. $\Gamma_1 = E, \Gamma_2 = T_2, \Gamma_3 = T_1$

$$-\frac{\sqrt{3}}{6}\psi^{E}_{vib2;\sqrt{3}(x^2-y^2)}\psi^{p;T_2}_{vib3;yz}R^{JM}_{T_1;x} - \frac{\sqrt{3}}{6}\psi^{E}_{vib2;\sqrt{3}(x^2-y^2)}\psi^{p;T_2}_{vib3;xz}R^{JM}_{T_1;y}$$
$$+\frac{\sqrt{3}}{3}\psi^{E}_{vib2;\sqrt{3}(x^2-y^2)}\psi^{p;T_2}_{vib3;xy}R^{JM}_{T_1;z} \tag{270}$$
$$+\frac{1}{2}\psi^{E}_{vib2;2z^2-x^2-y^2}\psi^{p;T_2}_{vib3;yz}R^{JM}_{T_1;x} + \frac{1}{2}\psi^{E}_{vib2;2z^2-x^2-y^2}\psi^{p;T_2}_{vib3;xz}R^{JM}_{T_1;y}.$$

Funkcja ta może być użyta do opisu stanu o parzystości dodatniej i ujemnej ($p = (\pm)$) o momencie pędu $J = 1, 3, 4, 5$. Ponieważ w obliczeniach nie pojawiają się stany $1^+, 1^-, 3^+, 5^+$, zatem nie są one wykorzystywane.

Dla modelu (R), w którym część oktupolowa opisana jest przez zmienne rzeczywiste, grupą symetryzacji jest $\overline{D}_{4;y}$. Analogicznie jak dla modelu (Z) przyjmijmy następujące oznaczenia:
$\psi^{\Gamma_1}_{vib2;u}$ - funkcja kwadrupolowa należąca do reprezentacji Γ_1 grupy $\overline{D}_{4;y}$, transformująca się identycznie jak wektor bazowy $u(x, y, z)$ reprezentacji Γ_1,
$\psi^{p;\Gamma_2}_{vib3;v}$ - funkcja oktupolowa o parzystości p dodatniej (ujemnej) transformująca się jak wektor bazowy $v(x, y, z)$ reprezentacji Γ_2,

$R^{JM}_{\Gamma_3;w}$ - funkcja rotacyjna transformująca się jak wektor bazowy $w(x, y, z)$ reprezentacji Γ_3.

Otrzymane dla $\overline{D}_{4;y}$ funkcje unormowane i zsymetryzowane dla stanów o momencie pędu $0 \leq J \leq 5$ mogą przyjmować postać:

1. $\Gamma_1 = A_1, \Gamma_2 = A_1, \Gamma_3 = A_1$

$$\psi^{A_1}_{vib2;x^2+z^2}\psi^{p;A_1}_{vib3;x^2+z^2}R^{JM}_{A_1;x^2+z^2} \tag{271}$$

Funkcja ta może być użyta do opisu stanu o parzystości dodatniej ($p = (+)$) o momencie pędu $J = 0, 2, 4, 5$. W modelu kolektywnym opisującym ^{156}Gd nie pojawia się stan 5^+, zatem nie jest on wykorzystywany w dalszych obliczeniach.

2. $\Gamma_1 = B_1, \Gamma_2 = A_1, \Gamma_3 = B_1$

$$\psi^{B1}_{vib2;x^2-z^2}\psi^{p;A_1}_{vib3;x^2+z^2}R^{JM}_{B_1;x^2-z^2} \tag{272}$$

Funkcja ta może być użyta do opisu stanu o parzystości dodatniej ($p = (+)$) o momencie pędu $J = 2, 3, 4, 5$. Ponieważ, dla naszego przypadku, nie pojawiają się stany 3^+ i 5^+, zatem nie są one wykorzystywane w dalszych obliczeniach.

3. $\Gamma_1 = A_1, \Gamma_2 = E, \Gamma_3 = E$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\psi^{A1}_{vib2;x^2+z^2}\psi^{p;E}_{vib3;x}R^{JM}_{E;x} + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi^{A1}_{vib2;x^2+z^2}\psi^{p;E}_{vib3;z}R^{JM}_{E;z} \tag{273}$$

Funkcja ta może być użyta do opisu stanu o parzystości ujemnej ($p = (-)$) o momencie pędu $J = 1, 2, 3, 4, 5$. Ponieważ nie pojawia się stan 1^-, zatem nie jest on wykorzystywany w dalszych obliczeniach.

4. $\Gamma_1 = B_1, \Gamma_2 = E, \Gamma_3 = E$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\psi^{B1}_{vib2;x^2-z^2}\psi^{p;E}_{vib3;x}R^{JM}_{E;x} - \frac{1}{\sqrt{2}}\psi^{B1}_{vib2;x^2-z^2}\psi^{p;E}_{vib3;z}R^{JM}_{E;z} \tag{274}$$

Stany jakie można uzyskać są analogiczne jak dla przypadku wcześniejszego, gdzie $\Gamma_3 = E$.

Powyższe funkcje mogą być użyte do budowy bardziej skomplikowanych stanów. W zależności od modelu, stany te są zbudowane tylko z pojedynczych funkcji (model (Z)) lub mogą tworzyć kombinacje liniowe funkcji posiadających tę samą budowę pod względem algebraicznym (model (R)). Dla ostatniego modelu wyjątkiem jest stan podstawowy 0^+, który w części wibracyjnej opisany jest przez jedną funkcję nie posiadającą wzbudzeń.

Postacie otrzymanych kombinacji liniowych funkcji **dla modelu (R)** przedstawione są poniżej.

W paśmie kwadrupolowym w zależności od momentu pędu mamy następujące stany:

dla J = 0 nie mamy żadnych wzbudzeń dlatego może składać się jedynie z jednej funkcji:

$$\Psi^{0(+)M}_{A_1A_1A_1} = \psi^{A_1}_{vib2;u_0u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=0M}_{A_1}, \tag{275}$$

gdzie indeks dolny przy funkcji wibracyjnej opisującej część kwadrupolową u_0u_0 oznacza, że funkcja bazowa $\psi^{A_1}_{vib2;u_0u_0}$ powstała z rzutu iloczynu dwóch funkcji oscylatora harmonicznego $u_0(\eta_2;\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20})u_0(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22})$ na reprezentację A_1. Analogicznie jest z opisem dla indeksów nie występujących dla $J=0$: u_1u_0 i u_0u_1, które oznaczają występowanie wzbudzenia odpowiednio przy funkcji zależnej od zmiennej α_{20} oraz α_{22}. Wibracyjna część oktupolowa $\psi^{(+);A_1}_{vib3}$ nie ma wzbudzeń i jest funkcją postaci:

$$u_0(\eta_3;\alpha_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_2;\alpha'_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_2;\alpha'_{32})u_0(\sqrt{2}\eta_2;\alpha'_{33}). \tag{276}$$

Identyczne oznaczenia są zastosowane dla pozostałych stanów znajdujących się w paśmie kwadrupolowym.

Dla J = 2 mamy dwie możliwości, różniące się reprezentacją opisującą kwadrupolową część wibracyjną oraz rotacyjną $\Gamma_1=\Gamma_3=A_1,\ B_1$. Funkcje tworzące ten stan składają się z iloczynu trzech funkcji:

$$\psi^{\Gamma_1}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi^{(+);A_1}_{vib3}(\{\alpha_{3\nu}\})R^{J=2M}_{\Gamma_3}, \tag{277}$$

które w zależności od wyboru $\Gamma_1,\ \Gamma_3$ tworzą stany:

$$\begin{aligned}\Psi^{2(+)M}_{A_1A_1A_1} &= \\ = w_1\psi^{A_1}_{vib2;u_0u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=2M}_{A_1} &+ w_2\psi^{A_1}_{vib2;u_1u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=2M}_{A_1} \\ &+ w_3\psi^{A_1}_{vib2;u_0u_1}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=2M}_{A_1},\end{aligned} \tag{278}$$

oraz

$$\begin{aligned}\Psi^{2(+)M}_{B_1A_1B_1}(\{\alpha_{2\mu}\},\{\alpha_{3\nu}\},\Omega) &= \\ = w_1\psi^{B_1}_{vib2;u_0u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=2M}_{B_1} &+ w_2\psi^{B_1}_{vib2;u_1u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=2M}_{B_1} \\ &+ w_3\psi^{B_1}_{vib2;u_0u_1}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=2M}_{B_1}.\end{aligned} \tag{279}$$

Dla J = 4 sytuacja jest analogiczna jak dla $J=2$. Funkcje bazowe tworzące stan mają postać:

$$\psi^{A_1}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi^{(+);A_1}_{vib3}(\{\alpha_{3\nu}\})R^{J=4M}_{A_1}. \tag{280}$$

Ponieważ mamy dwie możliwości wyboru reprezentacji opisującą wibracyjną część kwadrupolową oraz część rotacyjną $\Gamma_1 = \Gamma_3 = A_1,\ B_1$, możemy utworzyć dwa różne stany. Gdy $\Gamma_1 = \Gamma_3 = A_1$, wówczas stan ten składa się z sześciu składników, co związane jest z dwiema równoważnymi reprezentacjami A_1 dla funkcji rotacyjnej oraz trzema możliwościami występowania wzbudzenia dla kwadrupolowej funkcji wibracyjnej:

$$\begin{aligned}\Psi^{4(+)M}_{A_1A_1A_1} &= \\ = w_1\psi^{A_1}_{vib2;u_0u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{A_{1;1}} &+ w_2\psi^{A_1}_{vib2;u_1u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{A_{1;1}} \\ +w_3\psi^{A_1}_{vib2;u_0u_1}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{A_{1;1}} &+ w_4\psi^{A_1}_{vib2;u_0u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{A_{1;2}} \\ +w_5\psi^{A_1}_{vib2;u_1u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{A_{1;2}} &+ w_6\psi^{A_1}_{vib2;u_0u_1}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{A_{1;2}}.\end{aligned} \tag{281}$$

Drugą możliwością jest $\Gamma_1 = \Gamma_3 = B_1$. Wówczas mamy jedynie trzy składniki sumy:

$$\psi^{B_1}_{vib2}(\alpha_{20}, \alpha_{22})\psi^{(+);A_1}_{vib3}(\{\alpha_{3\nu}\})R^{J=4M}_{B_1}, \tag{282}$$

co daje następujący rozkład na funkcje bazowe:

$$\begin{aligned}\Psi^{4(+)M}_{B_1A_1B_1} &= \\ = w_1\psi^{B_1}_{vib2;u_0u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{B_1} &+ w_2\psi^{B_1}_{vib2;u_1u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{B_1} \\ &+w_3\psi^{B_1}_{vib2;u_0u_1}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{B_1}.\end{aligned} \tag{283}$$

W paśmie oktupolowym w zależności od momentu pędu mamy:

dla J = 3, istnieją dwie możliwości wyboru reprezentacji wibracyjnej funkcji kwadrupolowej $\Gamma_1 = A_1,\ B_1$ o funkcjach bazowych:

$$\psi^{\Gamma_1}_{vib2}(\alpha_{20}, \alpha_{22})\psi^{(-);E}_{vib3}(\{\alpha_{3\nu}\})R^{J=3M}_{E}. \tag{284}$$

Każdy z dwóch możliwych stanów składa się z ośmiu składników. Wynika to z istnienia dwóch równoważnych reprezentacji dwuwymiarowych E opisujące ruch rotacyjny oraz czterech możliwości uzyskania wibracyjnej funkcji oktupolowej:

$$\begin{aligned}\Psi^{3(-)M}_{\Gamma_1EE} &= \\ = w_1\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_1u_0u_0u_0}R^{J=3M}_{E;1} &+ w_2\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_1u_0u_0u_0}R^{J=3M}_{E;2}\end{aligned}$$

$$+w_3\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_1u_0u_0}R^{J=3M}_{E;1} + +w_4\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_1u_0u_0}R^{J=3M}_{E;2}$$
$$+w_5\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_1u_0}R^{J=3M}_{E;1} + w_6\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_1u_0}R^{J=3M}_{E;2}$$
$$+w_7\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_0u_1}R^{J=3M}_{E;1} + w_8\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_0u_1}R^{J=3M}_{E;2}, \tag{285}$$

gdzie $\Gamma_1 = A_1,\ B_1$. Kwadrupolowa funkcja bazowa pochodzi z funkcji początkowej $u_0(\eta_2;\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20})u_0(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22})$ zrzutowanej na reprezentację A_1 lub B_1. Część oktupolowa może pochodzić z jednej z czterech funkcji $u_i(\eta_3;\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30})u_j(\sqrt{2}\eta_2;\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31})u_k(\sqrt{2}\eta_2;\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32})u_l(\sqrt{2}\eta_2;\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}),\ i,j,k,l = 0,1,\ i+j+k+l=1$ zrzutowanych na reprezentację E. Podobnie funkcje rotacyjne zrzutowane są na reprezentację E.

Identyczne oznaczenia zastosowane dla tego stanu wykorzystywane są dla pozostałych stanów znajdujących się w pasmach oktupolowych.

Dla J = 5 w zależności od reprezentacji opisującej kwadrupolową funkcję wibracyjną $\Gamma_1 = A_1,\ B_1$ również mamy dwie możliwości opisu stanu. Dla każdego przypadku mamy dwanaście skladników postaci:

$$\psi^{\Gamma_1}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi^{(-);E}_{vib3}(\{\alpha_{3\nu}\})R^{J=5M}_{E}. \tag{286}$$

Rozkład na funkcje bazowe związany jest z istnieniem trzech równoważnych reprezentacji dwuwymiarowych E opisujących ruch rotacyjny oraz czterech możliwościach uzyskania oktupolowej funkcji wibracyjnej:

$$\Psi^{5(-)M}_{\Gamma_1 EE} =$$
$$= w_1\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_1u_0u_0u_0}R^{J=5M}_{E;1} + w_2\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_1u_0u_0u_0}R^{J=5M}_{E;2}$$
$$+w_3\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_1u_0u_0u_0}R^{J=5M}_{E;3} + w_4\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_1u_0u_0}R^{J=5M}_{E;1}$$
$$+w_5\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_1u_0u_0}R^{J=5M}_{E;2} + w_6\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_1u_0u_0}R^{J=5M}_{E;3}$$
$$+w_7\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_1u_0}R^{J=5M}_{E;1} + w_8\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_1u_0}R^{J=5M}_{E;2}$$

$$+w_9\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_1u_0}R^{J=5M}_{E;3} + w_{10}\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_0u_1}R^{J=5M}_{E;1}$$
$$+w_{11}\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_0u_1}R^{J=5M}_{E;2} + w_{12}\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_0u_1}R^{J=5M}_{E;3}, \tag{287}$$

gdzie $\Gamma_1 = A_1,\ B_1$.

Dla J = 2 mamy dwie reprezentacje wibracyjnej funkcji kwadrupolowej $\Gamma_1 = A_1,\ B_1$ oraz cztery różne wibracyjne funkcje oktupolowe. Funkcje bazowe wchodzące w skład stanu mają postać:

$$\psi^{\Gamma_1}_{vib2}(\alpha_{20}, \alpha_{22})\psi^{(-);E}_{vib3}(\{\alpha_{3\nu}\})R^{J=2M}_{E}, \tag{288}$$

a pełna funkcja:

$$\begin{aligned}\Psi^{2(-)M}_{\Gamma_1 EE}(\{\alpha_{2\mu}\}, \{\alpha_{3\nu'}\}, \Omega) = \\ = w_1\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_1u_0u_0u_0}R^{J=2M}_{E} + w_2\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_1u_0u_0}R^{J=2M}_{E} \\ +w_3\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_1u_0}R^{J=2M}_{E} + w_4\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_0u_1}R^{J=2M}_{E},\end{aligned} \tag{289}$$

gdzie $\Gamma_1 = A_1,\ B_1$.

Dla J = 4 istnieją dwie reprezentacje dla wibracyjnej funkcji kwadrupolowej $\Gamma_1 = A_1,\ B_1$. Dla każdego przypadku mamy po osiem składników:

$$\psi^{\Gamma_1}_{vib2}(\alpha_{20}, \alpha_{22})\psi^{(-);E}_{vib3}(\{\alpha_{3\nu}\})R^{J=4M}_{E}, \tag{290}$$

które pochodzą z czterech różnych oktupolowych funkcji początkowych oraz dwóch równoważnych reprezentacji E opisujących ruch rotacyjny:

$$\begin{aligned}\Psi^{4(-)M}_{\Gamma_1 EE}(\{\alpha_{2\mu}\}, \{\alpha_{3\nu'}\}, \Omega) \\ = w_1\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_1u_0u_0u_0}R^{J=4M}_{E;1} + w_2\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_1u_0u_0u_0}R^{J=4M}_{E;2} \\ +w_3\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_1u_0u_0}R^{J=4M}_{E;1} + w_4\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_1u_0u_0}R^{J=4M}_{E;2} \\ +w_5\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_1u_0}R^{J=4M}_{E;1} + w_6\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_1u_0}R^{J=4M}_{E;2} \\ +w_7\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_0u_1}R^{J=4M}_{E;1} + w_8\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_0u_1}R^{J=4M}_{E;2},\end{aligned} \tag{291}$$

gdzie $\Gamma_1 = A_1,\ B_1$.

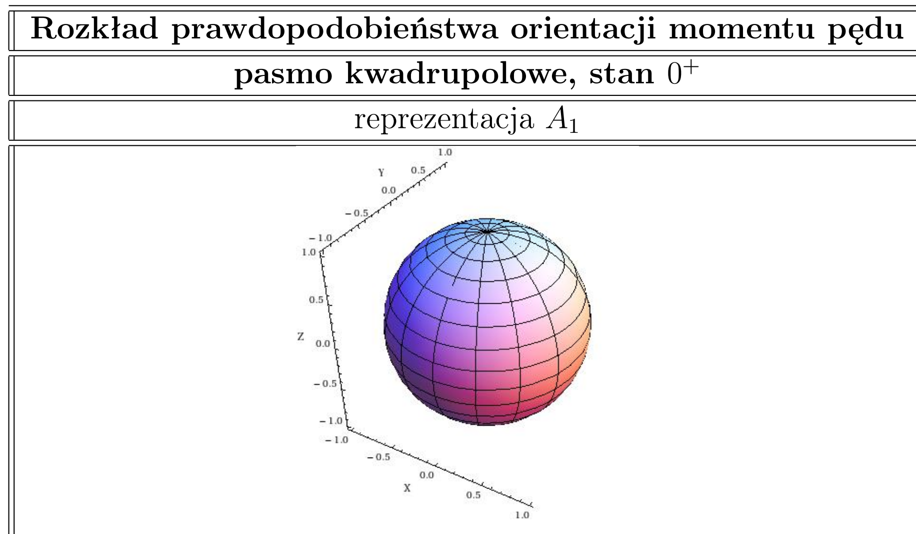
6.2.5 Struktura stanów rotacyjnych

Zgodnie z wcześniejszymi oznaczeniami funkcje rotacyjne są określone za pomocą momentu pędu J oraz indeksów $\Gamma_3,\ \Gamma'_3$ klasyfikujących te funkcje zgodnie ze schematem łańcucha grupowego $\overline{D}_{4;y} \supset \overline{D}_2$. Dodatkowo dla każdej z nich zostało obliczone prawdopodobieństwo orientacji momentu pędu

na podstawie którego można określić najbardziej prawdopodobny kierunek wektora momentu pędu.

Pełne wyprowadzenie potrzebnych formuł znajduje się w dodatku D.

Poniżej przedstawione są wyniki otrzymane graficznie. Kierunek momentu pędu określa prosta przechodząca przez wybrany punkt na powierzchni i początek układu współrzędnych. Długość wektora od początku układu współrzędnych do danego punktu na powierzchni określa prawdopodobieństwo wylosowania jego kierunku. Dla najprostszego przypadku stanu podstawowego 0^+ widać, że prawdopodobieństwo orientacji momentu pędu jest identyczne dla każdego z wybranych kierunków. Dokładny opis każdego stanu znajduje się pod otrzymanymi wykresami (4)-(10).

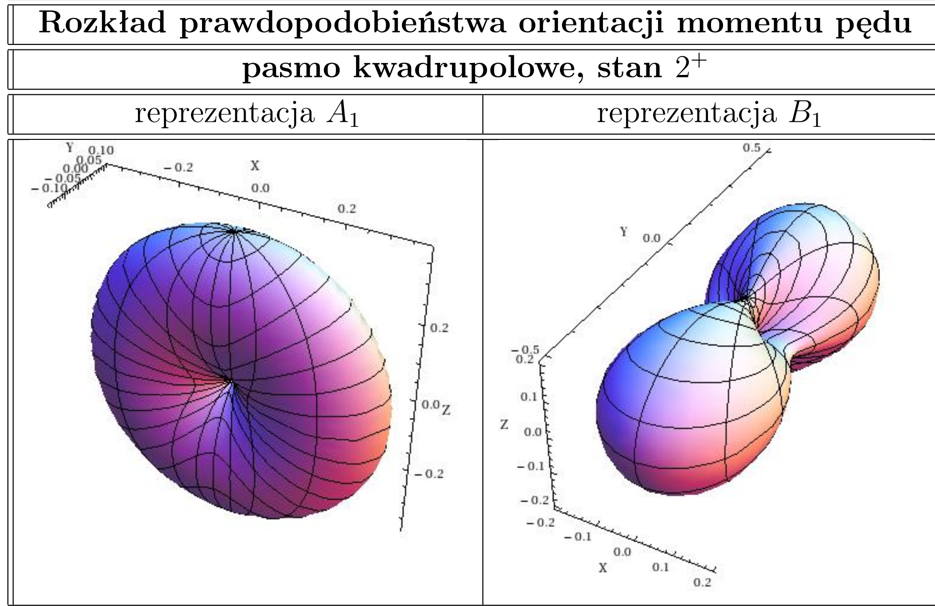


Rysunek 4: Rozkład prawdopodobieństwa orientacji momentu pędu dla stanu 0^+.

Otrzymane wykresy pokazują w jaki sposób może odbywać się kwantowy, rotacyjny ruch jądra atomowego. W naszym przypadku otrzymane struktury możemy podzielić na cztery grupy:

(a) Stany 0^+, 2^+, 2^-, gdzie dwa pierwsze stany należą do reprezentacji A_1, a trzeci do E. Dla tej grupy mamy nieskończenie wiele równoważnych kierunków wokół których może obracać się jądro. Dla stanu podstawowego 0^+ wszystkie osie obrotu są równoważne. W przypadku dwóch pozostałych stanów obrót wokół osi OY jest o wiele mniej prawdopodobny niż obrót wokół dowolnej osi obrotu leżącej w płaszczyźnie XZ.

(b) Stany 2^+ z reprezentacji B_1, 4^+ z $A_{1;1}$, 3^- z $E_{;1}$ oraz 5^- z reprezentacji $E_{;1}$. Dla tych stanów najprawdopodobniejszy jest obrót wokół osi OY.



Rysunek 5: Rozkład prawdopodobieństwa orientacji momentu pędu dla stanu 2^+.

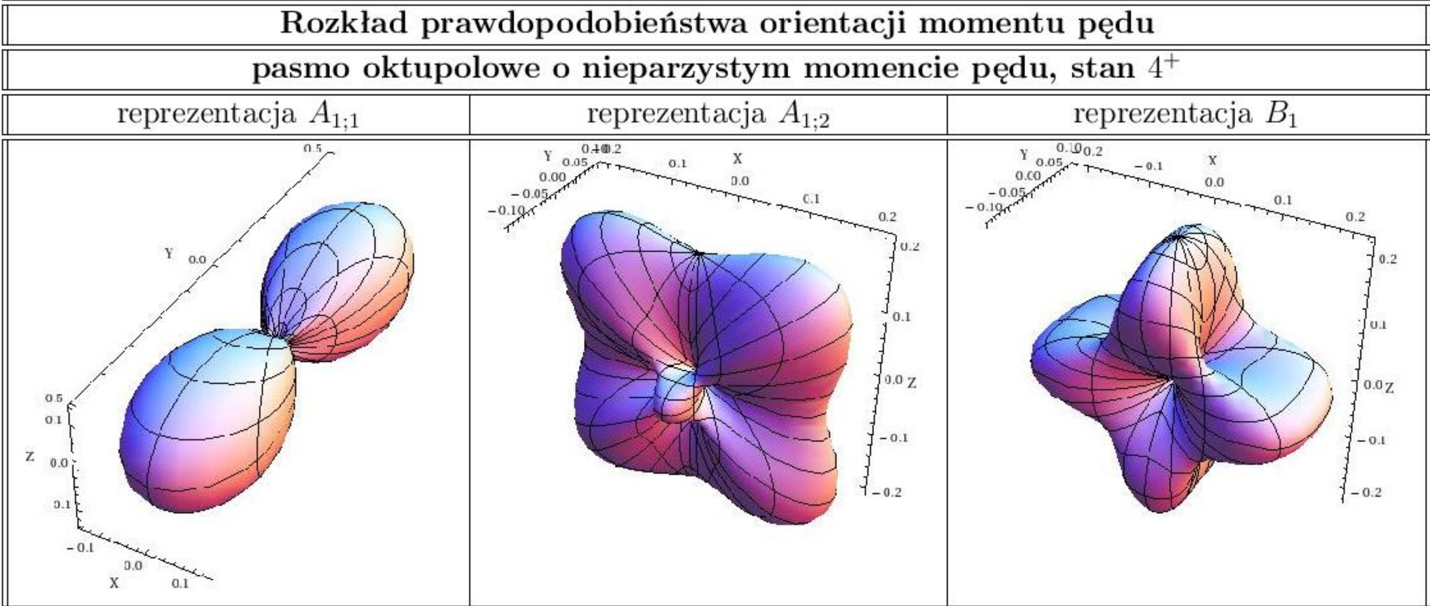
(c) Można wyodrębnić dwie podgrupy: pierwsza składa się ze stanów 4^+ z reprezentacji B_1, 3^- z $E_{;2}$, 4^- z $E_{;1}$ i 5^- z $E_{;3}$ oraz druga do której należą: 4^+ z reprezentacji $A_{1;2}$ i 4^- z $E_{;2}$. Dla czterech pierwszych stanów najbardziej prawdopodobnymi osiami obrotu są osie OX i OZ. Dla dwóch ostatnich stanów również mamy dwie osie wokół których obrót jest najbardziej prawdopodobny. Są one położone ukośnie względem układu odniesienia.

(d) Stan 5^- z reprezentacji $E_{;2}$ posiada cztery osie wokół których mamy największe prawdopodobieństwo obrotu. Osie te, podobnie jak dla dwóch stanów z grupy wcześniejszej, są obrócone względem osi układu współrzędnych.

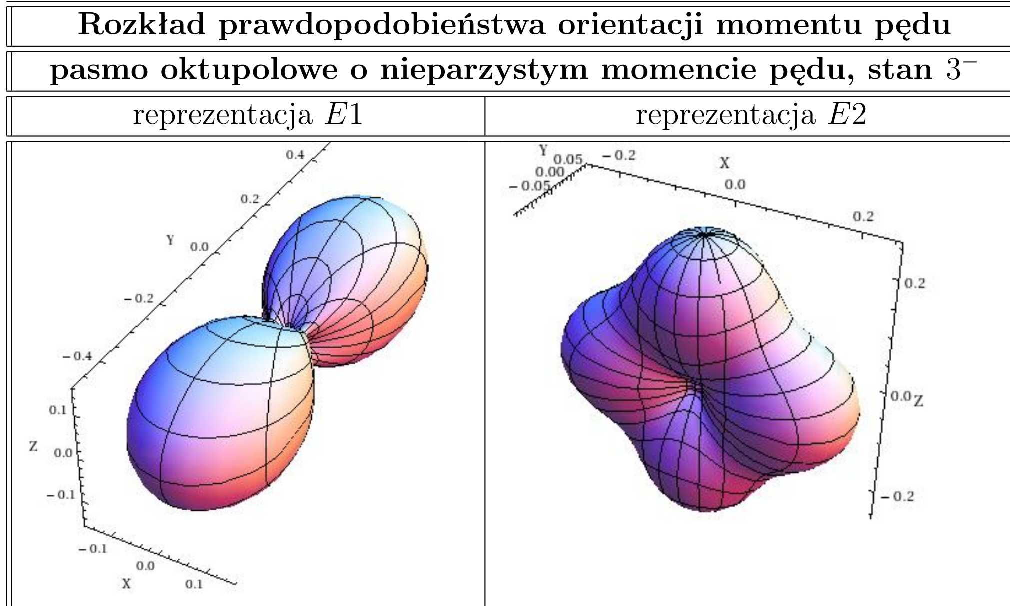
Rozpatrując przejścia pomiędzy stanami należącymi do jednej grupy widać, że nie wymagałoby to dużej zmiany kierunku momentu pędu. Wyjątkiem jest tylko stan podstawowy 0^+, którego rozkład prawdopodobieństwa kierunków osi obrotów jest taki sam w każdym z możliwych kierunków (graficznie przedstawione jest w postaci sfery).

Pomijając wypadki, gdy stany składają się z kombinacji funkcji posiadających różne reprezentacje w części rotacyjnej, można utworzyć trzy schematy o następujących, dominujących rozkładach prawdopodobieństwa orientacji momentu pędu. Poniżej podane są otrzymane schematy, dla których

Rozkład prawdopodobieństwa orientacji momentu pędu		
pasmo oktupolowe o nieparzystym momencie pędu, stan 4^+		
reprezentacja $A_{1;1}$	reprezentacja $A_{1;2}$	reprezentacja B_1



Rysunek 6: Rozkład prawdopodobieństwa orientacji momentu pędu dla stanu 4^+.



Rysunek 7: Rozkład prawdopodobieństwa orientacji momentu pędu dla stanu 3^-.

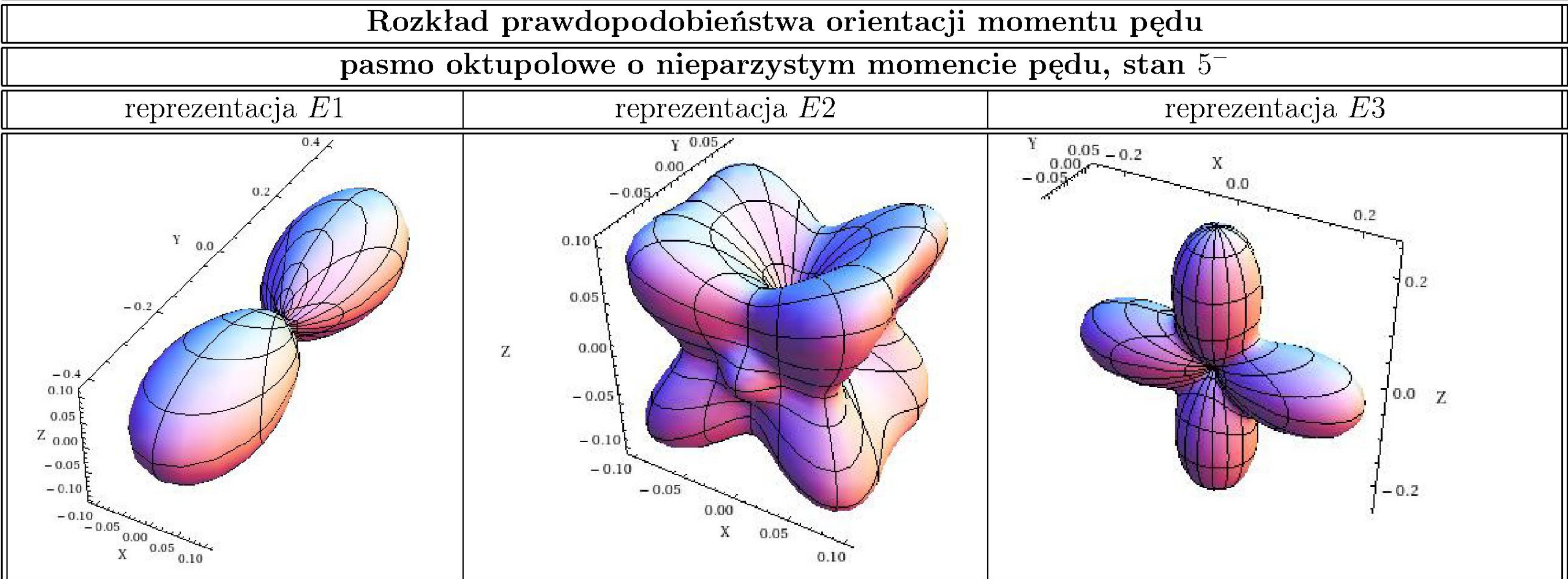
wyszczególnione są jedynie reprezentacje części rotacyjnej. Ponieważ do obliczeń prawdopodobieństwa orientacji momentu pędu reprezentacje dla funkcji wibracyjnych nie dają żadnego wkładu, dlatego w podanych poniżej schematach nie są one uwzględniane.

(i) Niech najbardziej prawdopodobną główną osią orientacji momentu pędu będzie OY, wówczas odpowiednimi reprezentacjami funkcji rotacyjnych powinny być reprezentacje przedstawione poniżej:

$$\begin{array}{ll} 0^+ : A_1 & 3^- : E_{;1} \\ 2^+ : B_1 & 5^- : E_{;1} \\ 4^+ : A_1 & \end{array} \tag{292}$$

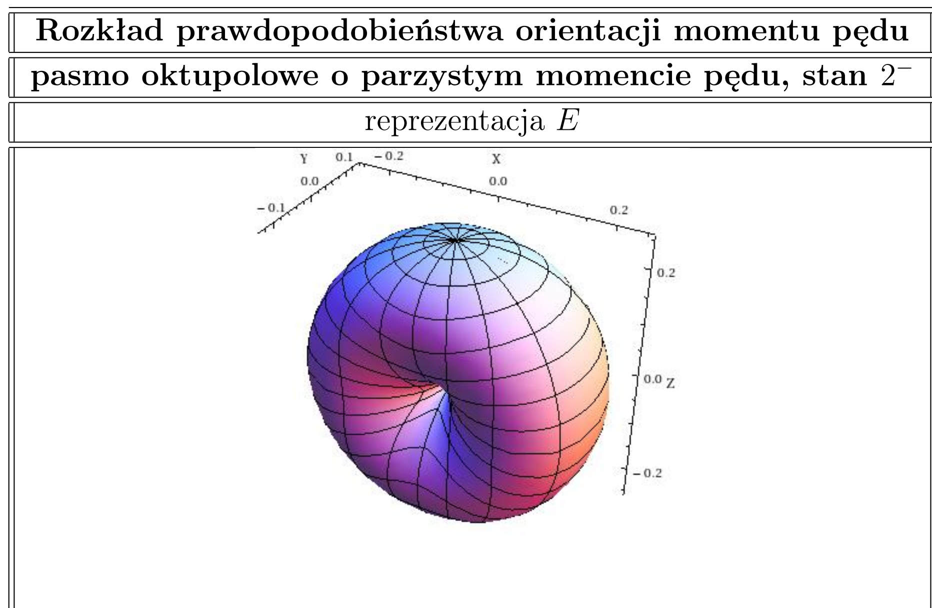
W tym przypadku mamy problem z wyborem funkcji dla stanów 2^- i 4^- ponieważ głównymi kierunkami wektora momentu pędu są osie OX i OZ lub ukośne. Jeżeli główną osią byłaby oś OY, wówczas udaje się utworzyć jedynie model dla dwóch pierwszych pasm energetycznych.

(ii) W przypadku gdy głównymi osiami orientacji wektora momentu pędu są OX i OZ, otrzymujemy następujące reprezentacje:



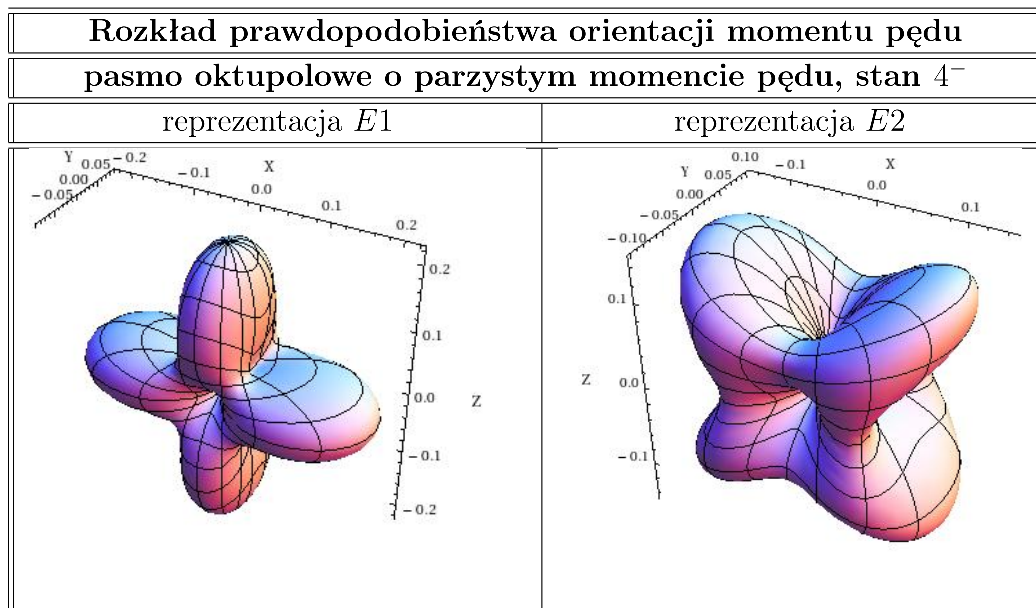
Rysunek 8: Rozkład prawdopodobieństwa orientacji momentu pędu dla stanu 5^-.

Rozkład prawdopodobieństwa orientacji momentu pędu
pasmo oktupolowe o parzystym momencie pędu, stan 2^-
reprezentacja E



Rysunek 9: Rozkład prawdopodobieństwa orientacji momentu pędu dla stanu 2^-.

Rozkład prawdopodobieństwa orientacji momentu pędu	
pasmo oktupolowe o parzystym momencie pędu, stan 4^-	
reprezentacja $E1$	reprezentacja $E2$



Rysunek 10: Rozkład prawdopodobieństwa orientacji momentu pędu dla stanu 4^-.

$$\begin{array}{lll} 0^+ : A_1 & 3^- : E_{;2} & 2^- : E \\ 2^+ : A_1 & 5^- : E_{;3} & 4^- : E_{;1} \\ 4^+ : B_1 & & \end{array} \quad (293)$$

Dla tego przypadku udaje się uworzyć pełny schemat trzech pasm dla modelu ze zmiennymi rzeczywistymi.

(iii) W przypadku osi obróconych względem osi układu współrzędnych analogicznie otrzymujemy:

$$\begin{array}{lll} 0^+ : A_1 & 3^- : - & 2^- : E \\ 2^+ : A_1 & 5^- : E_{;2} & 4^- : E_{;2} \\ 4^+ : A_{1;2} & & \end{array} \quad (294)$$

Gdy gęstość prawdopodobieństwa orientacji momentu pędu jest największa wzdłuż osi obróconych względem osi układu współrzędnych okazuje się, że można zbudować schemat zawierający wszystkie stany poza 3^-.

Podane powyżej schematy dotyczyły jedynie trzech możliwości wyboru osi głównych, tj. osi OY, dwóch osi OX i OZ oraz osi obróconych względem osi układu współrzędnych. Podział ten wynikał z otrzymanych rozkładów prawdopodobieństw orientacji momentu pędu. Każdy z tych trzech schematów posiada osie główne skierowane tylko w jednym z trzech możliwych wyodrębnionych kierunków. Są to przypadki kiedy nie ma wymieszanych trzech różnych orientacji wektora momentu pędu. W rzeczywistości stany w budowanych modelach mają skomplikowaną strukturę i każdy z nich może się składać z sumy funkcji bazowych należących do równoważnych reprezentacji, które różnią się jedynie osiami głównymi rozkładu gęstości prawdopodobieństwa orientacji wektora momentu pędu. Powoduje to, że w uzyskanych schematach opisujących trzy pasma ^{156}Gd osie główne wektora momentu pędu mogą należeć do więcej niż jednej z trzech podanych możliwości.

6.3 Zredukowane prawdopodobieństwa przejść elektromagnetycznych

Dalszym etapem próby znalezienia opisu ^{156}Gd korzystając tylko z własności algebraicznych stanów, jest obliczenie zredukowanych prawdopodobieństw przejść elektromagnetycznych wewnętrz i międzypasmowych. Opierając się

jedynie na pojęciu iloczynu Kroneckera dla każdego z omawianych modeli, można uzyskać dużą liczbę schematów, które mogłyby opisywać wybrany fragment widma ^{156}Gd. Okazało się jednak, że nie wszystkie są w stanie odtworzyć wartości przejść elektrycznych uzyskanych w eksperymentach [5] i [6].

Do obliczeń potrzebne są operatory multipolowe $\hat{Q}^{lab}_{\lambda\mu}$, które jednocześnie są tensorami sferycznymi rzędu λ, tzn. przenoszą moment pędu λ o różnych wartościach rzutu momentu pędu μ na oś kwantowania OZ. W ogólności tensory sferyczne w układzie laboratoryjnym można zdefiniować na dwa sposoby:

1. Wprowadzając odpowiednie komutatory momentu pędu i zbiór określonych operatorów, [21, 49, 75]:

   Definicja 3 (Tensor sferyczny). *Sferycznym (nieredukowalnym) tensorem $\hat{T}^{lab}_{\lambda}$ rzędu λ, gdzie $\lambda = n$ lub $\lambda = \frac{n}{2}$ dla $n \in \mathbb{Z}$, nazywamy zbiór $2\lambda+1$ liniowych operatorów $\hat{T}^{lab}_{\lambda\mu}$, $\mu = -\lambda, -\lambda+1, \cdots, \lambda-1, \lambda$ odwzorowujących przestrzeń Hilberta na siebie oraz spełniających następujące związki komutacyjne ze sferycznymi laboratoryjnymi składowymi operatora momentu pędu $\hat{J}^{lab}_{\nu}$, $\nu = 0, \pm 1$:*

$$[\hat{J}^{lab}_{\pm 1}\hat{T}^{lab}_{\lambda\mu}] = \mp\tfrac{1}{\sqrt{2}}e^{\pm i\delta}\sqrt{\lambda(\lambda+1)-\mu(\mu\pm 1)}\hat{T}^{lab}_{\lambda\mu\pm 1}, \tag{295a}$$

$$[\hat{J}^{lab}_{0}\hat{T}^{lab}_{\lambda\mu}] = \mu\hat{T}^{lab}_{\lambda\mu}. \tag{295b}$$

   Występująca w definicji $\delta \in \mathbb{R}$ oznacza dowolną fazę.

2. Częściej można spotkać inną definicję sferycznego tensora, która określa transformację jego składowych względem działanie grupy obrotów, [8, 21, 49, 74, 75]:

   Definicja 4 (Tensor sferyczny). *Zbiór operatorów $\hat{T}^{lab}_{\lambda\mu}$, $\mu = -\lambda, -\lambda + 1, \cdots, \lambda - 1, \lambda$ tworzy tensor symetryczny jeśli pod działaniem grupy obrotów $SO(3)$ przekształca się zgodnie z równaniem*

$$\mathcal{R}(\Omega)\hat{T}^{lab}_{\lambda\mu}\mathcal{R}^{-1}(\Omega) = \sum_{\mu'} D^{\lambda}_{\mu'\mu}(\Omega)\hat{T}^{lab}_{\lambda\mu'}. \tag{296}$$

Zgodnie ze wzorem (296) z definicji 4 związek pomiędzy składowymi operatora multipolowego w układzie laboratoryjnym $\hat{Q}^{lab}_{\lambda\mu}$ i wewnętrznym $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ jest, następujący, [54]:

$$\hat{Q}_{\lambda\mu}(\alpha_{\lambda\mu}) = \mathcal{R}(\Omega)\hat{Q}^{lab}_{\lambda\mu}\mathcal{R}^{-1}(\Omega) = \sum_{\mu'} D^{\lambda}_{\mu'\mu}(\Omega)\hat{Q}^{lab}_{\lambda\mu'}(\alpha^{lab}_{\lambda\mu}), \tag{297}$$

gdzie $\alpha_{\lambda\mu}$, Ω są zmiennymi wewnętrznymi.

Zredukowane prawdopodobieństwo przejść elektrycznych $B(E\lambda)$ przy emisji lub absorpcji fotonu o momencie pędu λ, pomiędzy stanem początkowym o momencie pędu J_1 i rzucie M_1 a stanem końcowym o momencie pędu J_2 i wszystkich możliwych dla tego stanu rzutach, opisane jest za pomocą wzoru, [55, 74]:

$$B(E\lambda; J_1 \to J_2) = \sum_{M_2,\mu} |\langle J_2 M_2 | \hat{Q}^{lab}_{\lambda\mu} | J_1 M_1 \rangle|^2. \tag{298}$$

Sumowanie po wszystkich możliwych stanach końcowych wynika z braku możliwości eksperymentalnych, które wymagałyby kontrolowania polaryzacji zarówno stanów jądrowych jak i fotonów. Element macierzowy dowolnego sferycznego tensora $\hat{T}^{lab}_{\lambda}$, a zatem operatora multipolowego $\hat{Q}^{lab}_{\lambda}$, można rozłożyć na dwa czynniki: opisujący geometrię lub własności symetryczne układu oraz przedstawiający część fizyczną [8, 21, 53, 75]:

Twierdzenie 1 (Wigner-Eckart)**.** *Każdy element macierzowy sferycznego operatora w bazie momentu pędu* $\langle J'M'|\hat{T}^{lab}_{\lambda\nu}|JM\rangle$ *jest iloczynem dwóch czynników zależnego jedynie od momentu pędu i własności stanów układu oraz niezależnego od rzutu momentu pędu:*

$$\langle J'M'|\hat{T}^{lab}_{\lambda\mu}|JM\rangle = \big(JM\lambda\mu|J'M'\big)\langle J'||\hat{T}^{lab}_{\lambda}||J\rangle. \tag{299}$$

Pierwszy czynnik opisany jet przez współczynniki Clebscha-Gordana, ([49, 75, 8]), i określa własności geometryczne, drugi przez zredukowany element macierzowy przedstawiający część fizyczną.

Dowód twierdzenia 1 można znaleźć między innymi w [21, 75].

Korzystając z twierdzenia Wignera-Eckarta wzór na zredukowane prawdopodobieństwo przejść (298) można przedstawić następująco, [8, 21, 55, 75]:

$$B(E\lambda; J_1 \to J_2) = \frac{|\langle J_2||\hat{Q}^{lab}_{\lambda}||J_1\rangle|^2}{\sqrt{2J_1+1}}. \tag{300}$$

Do obliczeń wartości zredukowanego prawdopodobieństwa przejść, dla dwóch omawianych modeli kolektywnych, zostały wykorzystane programy napisane przeze mnie w Mathematice.

W tym celu potrzebne były wyprowadzenia wzorów użytych do znalezienia odpowiedniej wartości $B(E\lambda; J_1 \to J_2)$, $\lambda = 1, 2$ dla funkcji opisujących stany każdego z modeli (dodatek H).

Znajomość przynależności stanu początkowego $\psi = \psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{\Gamma_2}_{vib3}R^{JM}_{\Gamma_3}$, końcowego $\psi' = \psi'^{\Gamma'_1}_{vib2}\psi'^{\Gamma'_2}_{vib3}R'^{J'M'}_{\Gamma'_3}$ oraz operatora $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ do reprezentacji grupy symetryzacji $\overline{G}_s$ pozwala szybko ustalić możliwe przejścia wzbronione.

Dodatkowo poza tak wyznaczonymi przejściami wzbronionymi mogą istnieć również stany dla których mimo, że jest spełniona zależność $\Gamma \times \Gamma^Q \supset \Gamma'$, gdzie Γ, Γ^Q, Γ' oznaczają nieprzywiedlne reprezentacje grupy $\overline{G}_s$ odpowiednio dla stanu początkowego ψ, operatora multipolowego $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ oraz stanu końcowego ψ'. W takim przypadku zerowanie się zredukowanego prawdopodobieństwa przejść $B(E2; J \to J')$ wynika z budowy stanów, które po obliczeniu i zsumowaniu elementów macierzowych dają wartość zerową.

Wiadomo, że w układzie laboratoryjnym zredukowane prawdopodobieństwo jest proporcjonalne do elementów macierzowych operatora $\hat{Q}^{lab}_{\lambda\mu}$. Przekształcając wzór (297) tak, aby otrzymać odwrotny związek, tj. przedstawienie operatora $\hat{Q}^{lab}_{\lambda\mu}$ za pomocą zmiennych wewnętrznych $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ mamy zależność od sprzężonych funkcji Wignera, [54]:

$$\hat{Q}^{lab}_{\lambda\mu} = \sum_{\mu'=-\lambda}^{\lambda} \hat{Q}_{\lambda\mu'} D^{\lambda\,*}_{\mu\mu'}(\Omega). \tag{301}$$

Znając powyższą transformację do układu wewnętrznego można obliczyć element macierzowy $\langle\psi'|\sum_{\mu'=-\lambda}^{\lambda} D^{\lambda*}_{\mu\mu'}(\Omega)\hat{Q}_{\lambda\mu'}|\psi\rangle$. Operator $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ wchodzi w skład elementu macierzowego obliczonego w układzie wewnętrznym, o przenoszonym momencie pędu λ, dla funkcji początkowej $\psi = \psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{\Gamma_2}_{vib3}R^{JM}_{\Gamma_3}$ mającej moment pędu J i rzut M i funkcji końcowej $\psi' = \psi'^{\,\Gamma_1'}_{vib2}\psi'^{\,\Gamma_2'}_{vib3}R'^{\,J'M'}_{\Gamma_3'}$ o momencie pędu J' i rzucie M':

$$\begin{aligned} &\langle\psi'|\textstyle\sum_{\mu'=-\lambda}^{\lambda} D^{\lambda*}_{\mu\mu'}(\Omega)\hat{Q}_{\lambda\mu'}|\psi\rangle \\ &= \textstyle\sum_{\mu'=-\lambda}^{\lambda}\langle\psi'^{\,\Gamma_1'}_{vib2}\psi'^{\,\Gamma_2'}_{vib3}|\hat{Q}_{\lambda\mu'}|\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{\Gamma_2}_{vib3}\rangle\langle R'^{\,J'M'}_{\Gamma_3'}|D^{\lambda*}_{\mu\mu'}(\Omega)|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle, \end{aligned} \tag{302}$$

gdzie ogólna postać operatora multipolowego w układzie wewnętrznym jest dana wzorem [52]:

$$\begin{aligned} \hat{Q}_{\lambda\mu} &= \tfrac{3ZR_0^\lambda}{4\pi}\Big\{\alpha_{\lambda\mu} + \tfrac{\lambda+2}{4\sqrt{\pi}}\textstyle\sum_{\lambda_1,\lambda_2}\sqrt{\tfrac{(2\lambda_1+1)(2\lambda_2+1)}{2\lambda+1}}(\lambda_1 0\lambda_2 0|\lambda 0)(\alpha_{\lambda_1}\otimes\alpha_{\lambda_2})_{\lambda\mu}\Big\}, \\ (\alpha_{\lambda_1}\otimes\alpha_{\lambda_2})_{\lambda\mu} &= \textstyle\sum_{\mu_1,\mu_2}(\lambda_1\mu_1\lambda_2\mu_2|\lambda\mu)\alpha_{\lambda_1\mu_1}\alpha_{\lambda_2\mu_2}. \end{aligned} \tag{303}$$

W zależności od budowy składowych operatora multipolowego oraz od wyboru grupy symetryzacji $\overline{G}_s = \overline{O}$, $\overline{D}_{4;y}$, podane powyżej wzory będą się różniły.

Dokładna postać otrzymanych składowych operatorów multipolowych dla $\lambda = 1, 2$ oraz rozkład ich na części należące do odpowiednich reprezentacji przedstawiony jest w dodatku G.

Ze względu na różną budowę w zmiennych kwadrupolowych i oktupolowych operatorów $\hat{Q}_{1\mu}$ i $\hat{Q}_{2\nu}$ zostały wprowadzone różne sposoby ich rozkładu na podprzestrzenie niezmiennicze względem grupy symetryzacji $\overline{G}_s = \overline{O}$, $\overline{D}_{4;y}$.

Operator dipolowy $\hat{\mathbf{Q}}_{\mathbf{1}\mu}$. W przypadku tego operatora można sprawdzić jak rozkłada się on na reprezentacje grupy wewnętrznej rzutując jego pełną postać opisaną zgodnie ze wzorem (303). Niestety informacja ta nie wystarcza do znalezienia reguł wyboru korzystając tylko z iloczynów Kroneckera. Wynika to z jego postaci, która składa się z kombinacji liniowych iloczynów zmiennej kwadrupolowej i oktupolowej (dodatek G), co można ogólnie zapisać:

$$\hat{Q}_{1\mu} = \sum_{\mu_2,\mu_3} c_{1\mu}^{\mu_2\mu_3} \alpha_{2\mu_2}\alpha_{3\mu_3}, \tag{304}$$

gdzie $c_{1\mu}^{\mu_2\mu_3}$ oznaczają współczynniki stojące przy poszczególnych iloczynach zmiennych $\alpha_{2\mu_2}\alpha_{3\mu_3}$. Ponieważ nie uwzględniamy deformacji dipolowej $\alpha_{1\mu}$, zatem w operatorze dipolowym nie występuje człon liniowy pojawiający się we wzorze (303).

Zatem rozkładamy operator dipolowy $\hat{Q}_{1\mu}$ na tensory względem grupy symetryzacji $\overline{G}_s = \overline{O},\ \overline{D}_{4;y}$ zgodnie z łańcuchem grupowym $\overline{G}_s \subset \overline{G}_{\alpha_2} \times \overline{G}_{\alpha_3} \times \overline{SO(3)}_\Omega$.

Każdą ze zmiennych kwadrupolowych $\alpha_{2\mu_2}$ i oktupolowych $\alpha_{3\mu_3}$ można rozłożyć odpowiednio na reprezentacje grupy $\overline{G}_{\alpha_2} = \overline{O},\ \overline{D}_{4;y}$ oraz $\overline{G}_{\alpha_3} = \overline{O},\ \overline{D}_{4;y}$, co przedstawiamy w postaci:

$$\alpha_{\lambda\mu} = \sum_\Gamma \sum_{a_\Gamma} A_{\lambda\mu}^{\Gamma a_\Gamma} \alpha_\lambda^{\Gamma a_\Gamma} \equiv \sum_\Gamma \alpha_{\lambda\mu}^\Gamma, \quad \lambda = 2, 3, \tag{305}$$

gdzie Γ są reprezentacjami grupy $\overline{G}_s$, na które rozkłada się zmienna $\alpha_{\lambda\mu}$, a a_Γ numerują wektory bazowe reprezentacji Γ.

Poniżej przedstawiony jest rozkład na reprezentacje grupy symetryzacji operatora $\hat{Q}_{1\mu}$.

W modelu (Z) korzystając ze wzorów (304-305) oraz z rozkładu na reprezentacje zmiennych $\alpha_{2\mu_2}$, $\alpha_{3\mu_3}$ (dodatek G) mamy:

$$\hat{Q}_{1\mu} = \sum_{\mu_2=0,2} \sum_{\mu_3=-3}^{3} c_{1\mu}^{\mu_2\mu_3} \alpha_{2\mu_2}^E \times \left\{ \alpha_{3\mu_3}^{T_1} + \alpha_{3\mu_3}^{T_2} \right\}. \quad \mu = 0, \pm 1 \tag{306}$$

Zatem część opisana zmiennymi kwadrupolowymi należy do reprezentacji dwuwymiarowej E, a oktupolowa rozkłada się na dwie reprezentacje trójwymiarowe T_1 i T_2.

W modelu (R) analogicznie jak dla modelu (Z) $\hat{Q}_{10}$, $\hat{Q}_{1\pm1}$ można rozłożyć zgodnie ze wzorami (304-305):

$$\hat{Q}_{1\mu} = \sum_{\mu_2,\mu_3} c_{1\mu}^{\mu_2\mu_3} \left\{\alpha_{2\mu_2}^{A_1} + \alpha_{2\mu_2}^{B_1}\right\} \times \alpha_{3\mu_3}^{E}, \quad \mu = 0, \pm1, \tag{307}$$

gdzie część kwadrupolowa rozkłada się na dwie reprezentacje jednowymiarowe A_1 i B_1, a część oktupolowa należy do reprezentacji dwuwymiarowej E.

Przynależność poszczególnych zmiennych wibracyjnych do odpowiednich reprezentacji grup wewnętrznych jest przedstawiona w dodatku G.

Korzystając ze wzorów (788-795) można elementy macierzowe operatora $\hat{Q}_{1\mu}^{lab}$ pomiędzy funkcjami $\psi = \psi_{vib2}^{\Gamma_1}\psi_{vib3}^{\Gamma_2}R_{\Gamma_3}^{JM}$ i $\psi' = \psi_{vib2}^{'\Gamma_1'}\psi_{vib3}^{'\Gamma_2}R_{\Gamma_3'}^{J'M'}$ zapisać jako:

$$\begin{aligned}\langle\psi'|\hat{Q}_{1\mu'}^{lab}|\psi\rangle &= \sum_{\mu'=-1}^{1}\langle\psi'|D_{\mu\mu'}^{1*}(\Omega)\hat{Q}_{1\mu'}|\psi\rangle \\ &= \sum_{\mu'=-1}^{1}\sum_{\mu_2,\mu_3} c_{1\mu}^{\mu_2\mu_3}\langle\psi_{vib2}^{'\Gamma_1'}|\sum_{\Gamma^{(2)}}\alpha_{2\mu_2}^{\Gamma^{(2)}}|\psi_{vib2}^{\Gamma_1}\rangle\langle\psi_{vib3}^{'\Gamma_2'}|\sum_{\Gamma^{(3)}}\alpha_{3\mu_3}^{\Gamma^{(3)}}|\psi_{vib3}^{\Gamma_2}\rangle \\ &\times\langle R_{\Gamma_3'}^{J'M'}|D_{\mu\mu'}^{1*}(\Omega)|R_{\Gamma_3}^{JM}\rangle.\end{aligned} \tag{308}$$

Powyższy wzór został użyty do znalezienia reguł wyboru dla przejść międzypasmowych przedstawionych w dalszej części pracy.

Operator kwadrupolowy $\hat{\mathbf{Q}}_{\mathbf{2}\mu}$. Dla grup wewnętrznych $\overline{O}$, $\overline{D}_{4;y}$ oraz zmiennych kwadrupolowych i oktupolowych otrzymujemy ogólną postać operatora przejść kwadrupolowych (dodatek G):

$$\hat{Q}_{2\mu'} = c_{2\mu'}\alpha_{2\mu'} + \sum_{\mu_2,\mu_2'} c_{2\mu'}^{\mu_2\mu_2'}\alpha_{2\mu_2}\alpha_{2\mu_2'} + \sum_{\mu_3,\mu_3'} d_{2\mu'}^{\mu_3\mu_3'}\alpha_{3\mu_3}\alpha_{3\mu_3'}. \tag{309}$$

W tym przypadku wygodniej jest podzielić operator (309) na dwa człony: człon zależny jedynie od zmiennych kwadrupolowych oraz człon opisany przez zmienne oktupolowe oznaczone jako:

$$\begin{aligned}\hat{Q}_{2\mu'}^{kw} &= c_{2\mu'}\alpha_{2\mu'} + \sum_{\mu_2,\mu_2'} c_{2\mu'}^{\mu_2\mu_2'}\alpha_{2\mu_2}\alpha_{2\mu_2'}, \\ \hat{Q}_{2\mu'}^{ok} &= \sum_{\mu_3,\mu_3'} d_{2\mu'}^{\mu_3\mu_3'}\alpha_{3\mu_3}\alpha_{3\mu_3'},\end{aligned} \tag{310}$$

gdzie $c_{2\mu'}$, $c_{2\mu'}^{\mu_2\mu_2'}$, $d_{2\mu'}^{\mu_3\mu_3'}$ są współczynnikami otrzymanymi ze wzoru (303).

Do każdego z podanych członów używamy operatora rzutowania uzyskując w ten sposób rozkład na reprezentacje części operatora opisanego tylko przez zmienne kwadrupolowe $\hat{Q}^{kw}_{2\mu'}$ oraz oktupolowe $\hat{Q}^{ok}_{2\mu'}$. Otrzymane rozkłady możemy ogólnie zapisać następująco:

$$\hat{Q}^{kw}_{2\mu'} = \sum_{\Gamma^{(2)}} \hat{Q}^{\Gamma^{(2)}\,kw}_{2\mu'},$$
$$\hat{Q}^{ok}_{2\mu'} = \sum_{\Gamma^{(3)}} \hat{Q}^{\Gamma^{(3)}\,ok}_{2\mu'}, \quad (311)$$

gdzie $\Gamma^{(2)}$ jest reprezentacją względem, której transformuje się część operatora $\hat{Q}_{2\mu'}$ zapisana w zmiennych kwadrupolowych, a $\Gamma^{(3)}$ w zmiennych oktupolowych.

W zależności od wyboru grupy symetryzacji otrzymujemy następujące rozkłady operatora kwadrupolowego na reprezentacje:

W modelu o zmiennych zespolonych (Z), z grupą symetryzacji $\overline{O}$, $\hat{Q}_{2\mu}$ ma rozkład:

(a) Dla $\hat{Q}_{20}$ niezerowy rzut istnieje jedynie dla reprezentacji dwuwymiarowej E:

$$\hat{Q}_{20} = \hat{Q}^{E\,kw}_{20} + \hat{Q}^{E\,ok}_{20}. \quad (312)$$

(b) Dla $\hat{Q}_{2\pm2}$ mamy oprócz reprezentacji dwuwymiarowej E również jedną trójwymiarową T_2:

$$\hat{Q}_{22} = \hat{Q}^{E\,kw}_{22} + \hat{Q}^{E\,ok}_{22} + \hat{Q}^{T_2\,ok}_{22}, \quad (313)$$
$$\hat{Q}_{2-2} = \hat{Q}^{E\,kw}_{2-2} + \hat{Q}^{E\,ok}_{2-2} + \hat{Q}^{T_2\,ok}_{2-2}. \quad (314)$$

Część opisana przez zmienne kwadrupolowe należy do reprezentacji dwuwymiarowej E, zaś część określona przez zmienne oktupolowe rozkłada się na dwa składniki, z których pierwszy należy do reprezentacji E a drugi do reprezentacji trójwymiarowej T_2.

(c) Dla $\hat{Q}_{2\pm1}$ występuje jedynie reprezentacja trójwymiarowa T_2:

$$\hat{Q}_{21} = \hat{Q}^{T_2\,ok}_{21}, \quad (315)$$
$$\hat{Q}_{2-1} = \hat{Q}^{T_2\,ok}_{2-1}. \quad (316)$$

W tym przypadku jedynymi zmiennymi opisującymi $\hat{Q}_{2\pm1}$ są zmienne oktupolowe i całość należy do jednej reprezentacji.

W modelu o rzeczywistych zmiennych (R) z grupą symetryzacji $\overline{D}_{4;y}$ mamy:

(a) Dla $\hat{Q}_{20}$ otrzymujemy następujący rozkład na reprezentacje:

$$\hat{Q}_{20} = \hat{Q}_{20}^{A_1\ kw} + \hat{Q}_{20}^{B_1\ kw} + \hat{Q}_{20}^{A_1\ ok} + \hat{Q}_{20}^{B_1\ ok}. \quad (317)$$

Zarówno część opisana przez zmienne kwadrupolowe jak i oktupolowe rozkłada się na dwa człony, które należą do reprezentacji jednowymiarowych A_1 i B_1.

(b) Dla $\hat{Q}_{2\pm2}$ mamy rozkład:

$$\hat{Q}_{2\pm2} = \hat{Q}_{2\pm2}^{A_1\ kw} + \hat{Q}_{2\pm2}^{B_1\ kw} + \hat{Q}_{2\pm2}^{A_1\ ok} + \hat{Q}_{2\pm2}^{B_1\ ok}. \quad (318)$$

Jak widać ten rozkład na reprezentacje jest identyczny jak dla $\hat{Q}_{20}$.

(c) Dla $\hat{Q}_{2\pm1}$ mamy:

$$\hat{Q}_{2\pm1} = \hat{Q}_{2\pm2}^{B_2\ ok}. \quad (319)$$

W tym przypadku jedynymi zmiennymi tworzącymi ten operator są zmienne oktupolowe, które dają jedną reprezentację jednowymiarową B_2.

Korzystając z powyższych wyników otrzymujemy, że ogólna postać elementów macierzowych dla operatora kwadrupolowego $\hat{Q}_{2\mu}^{lab}$ jest następująca:

$$\begin{aligned}\langle\psi'|\hat{Q}_{2\mu}^{lab}|\psi\rangle = \\ \sum_{\mu'=-2}^{2}\Big\{\langle\psi_{vib2}^{'\Gamma_1'}|\textstyle\sum_{\Gamma^{(2)}}\hat{Q}_{2\mu}^{\Gamma^{(2)}\ kw}|\psi_{vib2}^{\Gamma_1}\rangle\langle\psi_{vib3}^{'\Gamma_2'}|\psi_{vib3}^{\Gamma_2}\rangle \\ +\langle\psi_{vib2}^{'\Gamma_1'}|\psi_{vib2}^{\Gamma_1}\rangle\langle\psi_{vib3}^{'\Gamma_2'}|\textstyle\sum_{\Gamma^{(3)}}\hat{Q}_{2\mu}^{\Gamma^{(3)}\ ok}|\psi_{vib3}^{\Gamma_2}\rangle\Big\} \\ \times\langle R_{\Gamma_3'}^{J'M'}|D_{\mu\mu'}^{2}(\Omega)^{*}|R_{\Gamma_3}^{JM}.\rangle\end{aligned} \quad (320)$$

Powyższa postać elementów macierzowych dla operatora kwadrupolowego użyta jest do wyznaczenia reguł wyboru dla przejść wewnątrzpasmowych.

Otrzymane wyniki dotyczą postaci operatora kwadrupolowego i dipolowego opisanego za pomocą zmiennych wewnętrznych. Ponieważ celem jest obliczenie wartości zredukowanych prawdopodobieństw przejść elektromagnetycznych, które zostały wyznaczone eksperymentalnie w układzie laboratoryjnym, zatem zgodnie ze wzorem (302) przedstawione operatory pomnożone są jeszcze przez sprzężone funkcje Wignera. Ta część jest odpowiedzialna za ruch rotacyjny. Chcąc mieć pełną analizę pod względem algebraicznym trzeba

również sprawdzić jak zachowuje się rotacyjny element macierzowy. W tym celu trzeba znaleźć rozkład sprzężonych funkcji Wignera na reprezentacje grupy symetryzacji.

Reprezentacje otrzymane dla sprzężonych funkcji Wignera występujących w (300) są następujące:

W modelu (Z):

- **(i) dla przejść wewnątrzpasmowych** mamy:
  - (a) dla funkcji $D^2_{\mu\pm 2}(\Omega)^*$ otrzymujemy rozkład na dwie reprezentacje: dwuwymiarową E oraz trójwymiarową T_2,
  - (b) funkcja $D^2_{\mu\pm 1}(\Omega)^*$ należy do jednej z reprezentacji trójwymiarową T_2,
  - (c) funkcja $D^2_{\mu 0}(\Omega)^*$ należy do reprezentacji dwuwymiarowej E,
- **(ii) dla przejść międzypasmowych** i funkcji $D^1_{\mu\mu'}(\Omega)^*$, dla $\mu, \mu' = 0, \pm 1$, mamy tylko jedną reprezentację trójwymiarową T_1.

W modelu (R):

- **(i) dla przejść wewnątrzpasmowych** mamy:
  - (a) dla funkcji $D^2_{\mu\pm 2}(\Omega)^*$ otrzymujemy rozkład na trzy reprezentacje: dwuwymiarową E oraz dwie jednowymiarowe A_1, B_1,
  - (b) funkcja $D^2_{\mu\pm 1}(\Omega)^*$ należy do jednej z reprezentacji jednowymiarowej B_2 oraz dwuwymiarowej E,
  - (c) funkcja $D^2_{\mu 0}(\Omega)^*$ należy do dwóch reprezentacji jednowymiarowych A_1, B_1,
- **(ii) dla przejść międzypasmowych** mamy:
  - (a) dla funkcji $D^1_{\mu\pm 1}(\Omega)^*$ mamy rozkład na reprezentacje jednowymiarową A_2 oraz dwuwymiarową E,
  - (b) dla funkcji $D^1_{\mu 0}(\Omega)^*$ mamy rozkład na reprezentację dwuwymiarową E.

W dalszej części przedstawiona jest analiza elementów macierzowych użytych do obliczeń zredukowanego prawdopodobieństwa $B(E1)$ i $B(E2)$. Jak zostało to wcześniej wspomniane, będzie się ona opierać na własnościach algebraicznych operatorów multipolowych. Celem jest określenie reguł wyboru dla przejść elektromagnetycznych bez wyliczania wartości zredukowanego prawdopodobieństwa.

Przejść wzbronionych może być o wiele więcej niż te, które zostały znalezione na podstawie iloczynów Kroneckera dla reprezentacji. Stany takie

pojawiły się zarówno dla grupy $\overline{O}$ jaki dla $\overline{D}_4$, ale są tutaj pomijane. Dla nich zerowanie się $B(E1)$ i $B(E2)$ wynika z sumowania się elementów macierzowych i ciężko jest przewidzieć ich pojawienie się.

Jeśli wiadomo z danych eksperymentalnych, że zredukowane prawdopodobieństwa są różne od zera, wówczas korzystając z tej metody można szybko wyeliminować stany, które dają przejścia wzbronione. W przypadku, gdy wiadomo jakie przejścia są wzbronione i są charakterystyczne dla danego jądra atomowego, wówczas można szukać takich stanów dla których nie zachodzi (182).

Korzystając z informacji przedstawionych we wcześniejszym podrozdziale można określić, które stany trzeba brać pod uwagę podczas budowy schematów opisujących pasma energetyczne jądra atomowego. W naszym przypadku próba odtworzenia tych pasm dotyczy ^{156}Gd, dla którego wiadomo, że dla najniższych stanów pasm energetycznych o momencie pędu i parzystości: 0^+, 2^+, 4^+ oraz 3^-, 5^-, 2^-, 4^-, wartości $B(E1)$ i $B(E2)$ są niezerowe.

6.3.1 Międzypasmowe przejścia dipolowe

W zależności od wyboru modelu oraz korzystając ze wzoru (308) otrzymujemy następujące postacie elementów macierzowych:

Dla modelu (Z) postać elementu macierzowego operatora $\hat{Q}^{lab}_{1\mu}$ w układzie wewnętrznym jest następująca:

$$\begin{aligned}\langle\psi'|\hat{Q}^{lab}_{1\mu}|\psi\rangle &= \textstyle\sum_{\mu'=-1}^{1}\langle\psi'|D^{1}_{\mu\mu'}(\Omega)^{*}\hat{Q}_{1\mu'}|\psi\rangle \\ = \textstyle\sum_{\mu'=-1}^{1}\langle\psi^{'\Gamma_1'}_{vib2}|\alpha^{E}_{2\mu_2}|\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\rangle &\Big\{\langle\psi^{'\Gamma_2'}_{vib3}|\alpha^{T_1}_{3\mu_3}|\psi^{\Gamma_2}_{vib3}\rangle+\langle\psi^{'\Gamma_2'}_{vib3}|\alpha^{T_2}_{3\mu_3}|\psi^{\Gamma_2}_{vib3}\rangle\Big\} \\ &\times\langle R^{J'M'}_{\Gamma_3'}|(D^{1}_{\mu\mu'}(\Omega)^{*})_{T_1}|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle.\end{aligned} \tag{321}$$

Korzystając z tabel przedstawiających możliwe stany dla modelu (Z)[6] oraz z postaci elementów macierzowych (321), znajdujemy trzy rozłączne sytuacje pojawienia się przejścia wzbronionego. Jest to przypadek, gdy zeruje się jedna z trzech części:

(a) Element macierzowy opisany przez zmienne kwadrupolowe:

$$\langle\psi^{'\Gamma_1'}_{vib2}|\alpha^{E}_{2\mu_2}|\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\rangle = 0. \tag{322}$$

W tym przypadku kwadrupolowe funkcje bazowe dla początkowych stanów z pasma oktupolowego 3^-, 5^- i 4^- należą do jednej

[6] Ze względu, na to że mamy dwa modele o zmiennych zespolonych przedstawiona analiza jest przeprowadzona dla przypadku zawierającego większą liczbę możliwych stanów.

z reprezentacji A_1, A_2, E. Iloczyn Kroneckera reprezentacji A_1, A_2 i E oraz dwuwymiarowej reprezentacji E rozkłada się następująco, [9, 10]:

$$A_1 \times E = E, \tag{323}$$

$$A_2 \times E = E, \tag{324}$$

$$E \times E = A_1 + A_2 + E. \tag{325}$$

Zatem w zależności od wyboru stanu 4^+ otrzymujemy:

Dla $\mathbf{A_1A_1A_1}$ element macierzowy (322) może być różny od zera, gdy iloczyn Kroneckera $\Gamma_1 \times E$ zawiera $\Gamma_1' = A_1$[7]. Dotyczy to jedynie przypadku (325), czyli gdy kwadrupolowa funkcja bazowa stanu początkowego należy do reprezentacji E. Zatem wzbronione są przejścia $B(E1\colon 5^- \to 4^+)$, $B(E1\colon 3^- \to 4^+)$ i $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$, gdy stany 5^-, 3^-, 4^- zbudowane są z kwadrupolowej funkcji bazowej nie należącej do dwuwymiarowej reprezentacji E, tj.:

$$\begin{aligned} 5^-\colon &\quad A_1T_1T_1,\ A_1T_2T_2,\ A_2T_1T_2,\ A_2T_2T_1, \\ 3^-\colon &\quad A_1A_2A_2,\ A_1T_1T_1,\ A_1T_2T_2,\ A_2T_1T_2,\ A_2T_2T_1, \\ 4^-\colon &\quad A_1T_1T_1,\ A_1T_2T_2,\ A_2A_2A_1,\ A_2T_1T_2,\ A_2T_2T_1. \end{aligned} \tag{326}$$

W powyższym zapisie stanów, niezależnie od oznaczeń użytych dla iloczynów Kroneckera występujących w omawianych elementach macierzowych, interesuje nas tylko informacja do jakich nieprzywiedlnych reprezentacji należą poszczególne funkcje bazowe, tzn. $\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3$ oznacza, że kwadrupolowa funkcja bazowe należy do reprezentacji Γ_1, oktupolowa funkcja bazowa do Γ_2 a rotacyjna do Γ_3. Podany sposób oznaczania stanów jest wykorzystywany w dalszej części pracy.

Dla $\mathbf{EA_1E}$ element macierzowy (322), dla każdego z możliwych stanów może mieć wartość różną od zera. Wynika to z tego, że reprezentacja E opisująca część kwadrupolową stanu końcowego 4^+ występuje w każdym rozkładzie iloczynów Kroneckera (323)-(325).

Dla przejść $B(E1\colon 3^- \to 2^+)$ oraz $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ każdy wybór stanu początkowego i końcowego może dać niezerowe elementy macierzowe (322).

[7] Metoda otrzymania reguł wyboru przedstawiona jest w rozdziale 5.

(b) Drugi element macierzowy przedstawiony w (321) opisany jest przez zmienne oktupolowe:

$$\langle\psi'^{\Gamma_2'}_{vib3}|\alpha^{T_1}_{3\mu_3}|\psi^{\Gamma_2}_{vib3}\rangle + \langle\psi'^{\Gamma_2'}_{vib3}|\alpha^{T_2}_{3\mu_3}|\psi^{\Gamma_2}_{vib3}\rangle = 0. \quad (327)$$

W tej sytuacji, aby zaleźć przejścia wzbronione dla operatora dipolowego w części oktupolowej, trzeba rozważyć dwie reprezentacje T_1 i T_2. Ponieważ operator składa się z sumy dwóch elementów, zatem ta część zeruje się, gdy oba składniki mają wartość zero. Jedynymi stanami dla których nie ma przejścia $B(E1)$ są: dla 5^-: EA_2E, 3^-: $A_1A_2A_2$ oraz dla 4^-: $A_2A_2A_1$, EA_2E. Jest to związane, tak samo jak dla części kwadrupolowej, z iloczynem Kroneckera $T_1 \times A_2 = T_2$ oraz $T_2 \times A_2 = T_1$, który nie zawiera reprezentacji $\Gamma_2' = A_1$, do której należy funkcja oktupolowa stanu 4^+, [9, 10].

Dla pozostałych wyborów stanów początkowych oktupolowa funkcja bazowa należy do reprezentacji T_1 lub T_2. W iloczynie Kroneckera z reprezentacjami opisującymi elementy macierzowe (327) zawierają one reprezentację A_1 tylko dla jednego z dwóch elementów macierzowych (327). W przypadku, gdy mamy tylko pierwszy składnik (327) wówczas jest on niezerowy dla stanu początkowego należącego do reprezentacji T_1, a gdy mamy tylko drugi element macierzowy dotyczy to stanu początkowego należącego do reprezentacji T_2, [9, 10]:

$$T_1 \times T_1 = A_1 + E + T_1 + T_2, \quad (328)$$
$$T_1 \times T_2 = A_2 + E + T_1 + T_2, \quad (329)$$
$$T_2 \times T_1 = A_2 + E + T_1 + T_2, \quad (330)$$
$$T_2 \times T_2 = A_1 + E + T_1 + T_2. \quad (331)$$

Wyniki przedstawione dla części oktupolowej elementów macierzowych dotyczą każdego wyboru stanu 4^+. W obu przypadkach oktupolowa funkcja bazowa należy do tej samej reprezentacji skalarnej A_1.

Dla przejść $B(E1\colon 3^- \to 2^+)$ jest identyczna sytuacja jak dla $B(E1\colon 3^- \to 4^+)$, gdy 4^+: EA_1E.

W przypadku przejścia $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ przejście wzbronione jest dla stanu 2^-: EA_2E.

(c) Element macierzowy opisany przez zmienne rotacyjne:

$$\langle R'^{J'M'}_{\Gamma_3'}|(D^1_{\mu\mu'}(\Omega)^*)_{T_1}|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle = 0. \quad (332)$$

Ponieważ każda sprzężona funkcja Wignera $D^1_{\mu\mu'}(\Omega)^*$, $\mu, \mu' = 0, \pm 1$ należy do reprezentacji trójwymiarowej T_1, zatem nasza analiza sprowadza się jedynie do następujących iloczynów Kroneckera, [9, 10]:

$$T_1 \times A_1 = T_1, \tag{333}$$
$$T_1 \times A_2 = T_2, \tag{334}$$
$$T_1 \times E = T_1 + T_2, \tag{335}$$
$$T_1 \times T_1 = A_1 + E + T_1 + T_2, \tag{336}$$
$$T_1 \times T_2 = A_2 + E + T_1 + T_2. \tag{337}$$

Korzystając z (333)-(337) możemu otrzymać następujące przejścia wzbronione:

- dla stanu 4^+: $A_1A_1A_1$:
  - $B(E1\colon 5^- \to 4^+)$ może mieć wartość równą zero, dla stanów początkowych:

$$5^- : \; A_1T_2T_2,\; A_2T_1T_2,\; EA_2E,\; ET_1T_2,\; ET_2T_2, \tag{338}$$

  - $B(E1\colon 3^- \to 4^+)$ może mieć wartość równą zero, gdy stanami początkowymi są:

$$3^- : \; A_1A_2A_2,\; A_1T_2T_2,\; A_2T_1T_2,\; ET_1T_2,\; ET_2T_2, \tag{339}$$

  - podobnie $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ może mieć wartość równą zero, dla 4^- postaci:

$$4^- : \; A_2A_2A_1,\; A_1T_2T_2,\; A_2T_1T_2,\; EA_2E,\; ET_1T_2,\; ET_2T_2, \tag{340}$$

- dla stanu 4^+: EA_1E:
  - $B(E1\colon 5^- \to 4^+)$ może mieć wartość równą zero, gdy:

$$5^- : \; EA_2E, \tag{341}$$

  - $B(E1\colon 3^- \to 4^+)$ może mieć wartość równą zero, gdy:

$$3^- : \; A_1A_2A_2, \tag{342}$$

  - $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ może mieć wartość równą zero w przypadku, gdy:

$$4^- : \; A_2A_2A_1,\; EA_2E. \tag{343}$$

- dla stanu 4^+: $A_1A_1A_1, EA_1E$:
  - dla $B(E1 : 3^- \to 2^+)$ jedynym przejściem wzbronionym jest przypadek, gdy 3^- : $A_1A_2A_2$.
  - dla $B(E1 : 2^- \to 2^+)$ również mamy tylko jedno przejście wzbronione dla 2^- : EA_2E.

Jak widać, w przypadku, gdy stanem końcowym jest 4^+: EA_1E otrzymujemy mniej przejść wzbronionych niż dla 4^+: $A_1A_1A_1$. Zatem większa liczba schematów, które mogłyby opisać jądro atomowe mające niezerowe przejścia międzypasmowe odpowiada wyborowi stanu 4^+: EA_1E.

Dla modelu (R) elementy macierzowe $\hat{Q}^{lab}_{1\mu}$ wchodzące w skład zredukowanego prawdopodobieństwa przejść można rozłożyć na następujące sumy dla dowolnego μ:

(i) dla $\mu' = \pm 1$:

$$\begin{aligned}\langle \psi'^{\Gamma'_1}_{vib2}\psi'^{\Gamma_2}_{vib3}|\hat{Q}_{1\pm1}|\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{\Gamma_2}_{vib3}\rangle\langle R'^{\,J'M'}_{\Gamma'_3}|D^1_{\mu\pm1}(\Omega)^*|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle \\ = \Big\{\langle\psi'^{\Gamma'_1}_{vib2}|\alpha^{A_1}_{2\mu_2}|\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\rangle + \langle\psi'^{\Gamma'_1}_{vib2}|\alpha^{B_1}_{2\mu_2}|\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\rangle\Big\} \\ \times\langle\psi'^{\Gamma'_2}_{vib3}|\alpha^{E}_{3\mu_3}|\psi^{\Gamma_2}_{vib3}\rangle \qquad (344) \\ \times\Big\{\langle R'^{\,J'M'}_{\Gamma'_3}|(D^1_{\mu\pm1}(\Omega)^*)_{A_2}|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle + \langle R'^{\,J'M'}_{\Gamma'_3}|(D^1_{\mu\pm1}(\Omega)^*)_{E}|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle\Big\},\end{aligned}$$

(ii) dla $\mu' = 0$:

$$\begin{aligned}\langle \psi'^{\Gamma'_1}_{vib2}\psi'^{\Gamma'_2}_{vib3}|\hat{Q}_{10}|\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{\Gamma_2}_{vib3}\rangle\langle R'^{\,J'M'}_{\Gamma'_3}|D^1_{\mu0}(\Omega)^*|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle \\ = \Big\{\langle\psi'^{\Gamma'_1}_{vib2}|\alpha^{A_1}_{2\mu_2}|\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\rangle + \langle\psi'^{\Gamma'_1}_{vib2}|\alpha^{B_1}_{2\mu_2}|\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\rangle\Big\} \\ \times\langle\psi'^{\Gamma'_2}_{vib3}|\alpha^{E}_{3\mu_3}|\psi^{\Gamma_2}_{vib3}\rangle\langle R'^{\,J'M'}_{\Gamma'_3}|(D^1_{\mu0}(\Omega)^*)_{E}|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle. \qquad (345)\end{aligned}$$

Część rotacyjna będzie zerować $B(E1)$, gdy wszystkie składowe sumy po μ będą miały wartość zero.

Korzystając z iloczynów Kroneckera, [9, 10]:

$$A_1 \times A_1 = A_1, \qquad (346)$$

$$A_1 \times B_1 = B_1, \qquad (347)$$

$$A_2 \times E = E, \qquad (348)$$

$$B_1 \times B_1 = A_1, \qquad (349)$$

$$E \times A_1 = E, \qquad (350)$$

$$E \times B_1 = E, \qquad (351)$$

$$E \times E = A_1 + A_2 + B_1 + B_2, \qquad (352)$$

oraz z tabel przedstawiających możliwe stany dla modelu (R) widać, że każdy z elementów macierzowych może mieć wartość różną od zera.

Jedynym wyjątkiem jest $\langle R'^{J'M'}_{\Gamma'_3}|(D^1_{\mu\pm1}(\Omega)^*)_{A_2}|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle$. Dla tego elementu macierzowego z (348) otrzymujemy, że końcowa funkcja bazowa w części rotacyjnej powinna należeć do reprezentacji dwuwymiarowej E. W naszym przypadku w przejściach międzypasmowych pomiędzy pasmami oktupolowymi i kwadrupolowymi mamy w stanie końcowym reprezentacje jednowymiarowe. Zatem ten element macierzowy będzie miał wartość równą zero. Ponieważ oprócz niego istnieje jeszcze jeden człon, który może mieć wartości różne od zera, zatem nie powoduje on zerowania się całości wyrażenia (345).

Ponieważ każdy ze składników sumy potrzebnej do wyliczenia $B(E1)$ w części rotacyjnej może mieć wartości różne od zera, zatem nie występują międzypasmowe przejścia wzbronione wynikające z przynależności sprzężonych funkcji Wignera do reprezentacji nieprzywiedlnych.

Oczywiście $B(E1)$ może uzyskać wartość zero z więcej niż jednej części opisującej ruch kolektywny.

Schematy pasm energetycznych posiadające niezerowe wartości $B(E1)$. Korzystając z wcześniejszych rozważań można utworzyć następujące modele pasm energetycznych, dla których wartości przejść mogą mieć niezerowe wartości zredukowanych prawdopodobieństw przejść międzypasmowych $B(E1)$. Cały czas trzeba pamiętać, że są to jedynie schematy, które zostały wybrane korzystając tylko z własności algebraicznych stanów. Otrzymane wyniki mogą dotyczyć dowolnych funkcji bazowych, pod warunkiem, że należą do odpowiednich reprezentacji grup wewnętrznych $\overline{O}$ lub $\overline{D}_{4;y}$.

Dla modelu (Z) z grupą symetryzacji $\overline{O}$, mamy dwa zbiory schematów pasm energetycznych, podzielonych względem budowy pasma kwadrupolowego:

(i) pierwszy zbiór schematów posiada stany:

(a) pasmo kwadrupolowe

$$\begin{aligned} 4^+ &: A_1A_1A_1, \\ 2^+ &: EA_1E, \\ 0^+ &: A_1A_1A_1, \end{aligned} \tag{353}$$

(b) pasmo oktupolowe o nieparzystym momencie pędu:

$$3^-,\ 5^-: ET_1T_1,\ ET_2T_1, \tag{354}$$

(c) pasmo oktupolowe o parzystym momencie pędu:

$$\begin{aligned} 2^-&: A_1T_2T_2,\ A_2T_1T_2,\ ET_1T_2,\ ET_2T_2 \\ 4^-&: ET_1T_1,\ ET_2T_1, \end{aligned} \tag{355}$$

(ii) drugi zbiór schematów ma postać:

(a) pasmo kwadrupolowe

$$\begin{aligned} 4^+&: EA_1E, \\ 2^+&: EA_1E, \\ 0^+&: A_1A_1A_1, \end{aligned} \tag{356}$$

(b) pasmo oktupolowe o nieparzystym momencie pędu:

$$\begin{aligned} 5^-&: A_1T_1T_1,\ A_1T_2T_2,\ A_2T_1T_2,\ A_2T_2T_1, \\ &\quad ET_1T_1,\ ET_1T_2,\ ET_2T_1,\ ET_2T_2, \\ 3^-&: A_1T_1T_1,\ A_1T_2T_2,\ A_2T_1T_2,\ A_2T_2T_1, \\ &\quad ET_1T_1,\ ET_1T_2,\ ET_2T_1,\ ET_2T_2, \end{aligned} \tag{357}$$

(c) pasmo oktupolowe o parzystym momencie pędu:

$$\begin{aligned} 2^-&: A_1T_2T_2,\ A_2T_1T_2,\ ET_1T_2,\ ET_2T_2 \\ 4^-&: A_1T_1T_1,\ A_1T_2T_2,\ A_2T_1T_2,\ A_2T_2T_1, \\ &\quad ET_1T_1,\ ET_1T_2,\ ET_2T_1,\ ET_2T_2. \end{aligned} \tag{358}$$

Dla modelu (R) nie ma wzbronionych przejść międzypasmowych wynikających z budowy algebraicznej stanów. Schematy pasm energetycznych jakie można utworzyć w tym przypadku z następujących stanów:

(i) pasmo kwadrupolowe:

$$\begin{aligned} 4^+&: A_1A_1A_1,\ B_1A_1B_1, \\ 2^+&: A_1A_1A_1,\ B_1A_1B_1, \\ 0^+&: A_1A_1A_1, \end{aligned} \tag{359}$$

(ii) pasmo oktupolowe o nieparzystym momencie pędu:

$$5^-: A_1EE,\ B_1EE,$$
$$3^-: A_1EE,\ B_1EE. \quad (360)$$
$$(361)$$

(iii) pasmo oktupolowe o parzystym momencie pędu:

$$2^-: A_1EE,\ B_1EE, \quad (362)$$
$$4^-: A_1EE,\ B_1EE. \quad (363)$$

6.3.2 Wewnątrzpasmowe przejścia kwadrupolowe

W tej części przedstawione są wyniki dotyczące wzbronionych wewnątrzpasmowych przejść $B(E2)$. Dalsze obliczenia dotyczą schematów otrzymanych we wcześniejszym podrozdziale, gdzie wartości $B(E1)$ mogą być niezerowe. Oczywiście można te obliczenia rozszerzyć na wszystkie możliwe stany, które zostały otrzymane dla dwóch grup symetryzacji $\overline{O}$ i $\overline{D}_{4;y}$. W naszym przypadku, ze względu na nasz cel, czyli próbę odtworzenia wartości eksperymentalnych $B(E1)$ i $B(E2)$ dla ^{156}Gd, rozważanie wszystkich stanów nie jest potrzebne. Z danych otrzymanych z [5] i [6] wynika, że interesują nas jedynie stany opisujące poszczególne pasma, dla których zredukowane prawdopodobieństwo przejść międzypasmowych jest różne od zera.

Podobnie jak dla $B(E1)$, będą wykorzystane odpowiednie iloczyny Kroneckera, w których występuje nieprzywiedlna reprezentacja, do której należy operator $\hat{Q}_{2\mu},\ \mu = 0, \pm 1, \pm 2$.

Ogólna postać elementów macierzowych dla operatora kwadrupolowego $\hat{Q}^{lab}_{2\mu}$ jest następująca:

$$\langle\psi'|\hat{Q}^{lab}_{2\mu}|\psi\rangle =$$
$$\sum_{\mu'=-2}^{2}\left\{\langle\psi^{'\Gamma_1'}_{vib2}|\hat{Q}^{kw}_{2\mu'}|\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\rangle\langle\psi^{'\Gamma_2'}_{vib3}|\psi^{\Gamma_2}_{vib3}\rangle + \langle\psi^{'\Gamma_1'}_{vib2}|\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\rangle\langle\psi^{'\Gamma_2'}_{vib3}|\hat{Q}^{ok}_{2\mu'}|\psi^{\Gamma_2}_{vib3}\rangle\right\}$$
$$\times\langle R^{J'M'}_{\Gamma_3'}|D^2_{\mu\mu'}(\Omega)^*|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle. \quad (364)$$

Analogicznie jak dla przejść międzypasmowych, zostały rozważone osobno trzy części opisujące otrzymane elementy macierzowe w zależności od rodzaju zmiennych wewnętrznych.

W modelu o zmiennych zespolonych (Z) mamy następujący rozkład składowych operatora kwadrupolowego na reprezentacje grupy $\overline{O}$:

(a) dla $\hat{Q}_{20}$ mamy:

$$\hat{Q}_{20} = \hat{Q}_{20}^{E\,kw} + \hat{Q}_{20}^{E\,ok}, \tag{365}$$

(b) dla $\hat{Q}_{2\pm2}$:

$$\hat{Q}_{2\pm2} = \hat{Q}_{2\pm2}^{E\,kw} + \hat{Q}_{2\pm2}^{E\,ok} + \hat{Q}_{2\pm2}^{T_2\,ok}, \tag{366}$$

(c) dla $\hat{Q}_{2\pm1}$:

$$\hat{Q}_{2\pm1} = \hat{Q}_{2\pm1}^{T_2\,ok}. \tag{367}$$

W omawianym modelu mamy dwa zbiory schematów wynikające z postaci stanu 4^+: $A_1A_1A_1$, EA_1E. Do dalszych obliczeń będą potrzebne następujące iloczyny Kroneckera, [2, 9, 10]:

$$A_1 \times E = E, \tag{368}$$
$$A_2 \times E = E, \tag{369}$$
$$E \times E = A_1 + A_2 + E, \tag{370}$$
$$T_1 \times E = T_1 + T_2, \tag{371}$$
$$T_2 \times E = T_1 + T_2, \tag{372}$$
$$A_1 \times T_2 = T_2, \tag{373}$$
$$T_1 \times T_2 = A_2 + E + T_1 + T_2, \tag{374}$$
$$T_2 \times T_2 = A_1 + E + T_1 + T_2. \tag{375}$$
(376)

W ten sposób otrzymujemy:

Dla elementu macierzowego $\langle \psi_{\mathbf{vib2}}^{'\mathbf{\Gamma_1'}} | \mathbf{\hat{Q}_{2\mu}^{E\,kw}} | \psi_{\mathbf{vib2}}^{\mathbf{\Gamma_1}} \rangle$ oraz

- **pasma kwadrupolowego** o końcowym stanie mającym moment pędu 4^+ iloczyn Kroneckera $\Gamma_1 \times E$ zawiera Γ_1'. Zatem może on mieć niezerowe wartości dla dowolnych reprezentacji Γ_1, Γ_1' uzyskanych dla tego modelu;
- **pasma oktupolowego o nieparzystym momencie pędu** i dla schematów posiadających stan:

  4^+: $\mathbf{EA_1E}$ - wartości ich mogą być różne od zera,

  4^+: $\mathbf{A_1A_1A_1}$ - nie wszystkie elementy macierzowe mogą mieć wartości różne od zera. Dla nich mamy następujące stany początkowe zerujące element macierzowy:

  5^-: $A_1T_1T_1,\ A_1T_2T_2,\ A_2T_1T_2,\ A_2T_2T_1,$

  3^-: $A_1T_1T_1,\ A_1T_2T_2,\ A_2T_1T_2,\ A_2T_2T_1;$

- **pasma oktupolowego o parzystym momencie pędu** i dla schematów mających stany końcowe:

  $\mathbf{4^+}$: $\mathbf{A_1A_1A_1}$ - wartości elementów macierzowych mogą być różne od zera,

  $\mathbf{4^+}$: $\mathbf{EA_1E}$ - z iloczynu Kroneckera wynika, że każdy wybór stanu początkowego daje rozkład na reprezentacje zawierający Γ'_1. Zatem w tym przypadku elementy macierzowe mogą mieć wartości różne od zera.

Dla elementów macierzowych $\langle\psi'^{\Gamma'_2}_{\mathbf{vib3}}|\hat{\mathbf{Q}}^{\mathbf{E\,ok}}_{\mathbf{2}\mu}|\psi^{\Gamma_2}_{\mathbf{vib3}}\rangle$ **i** $\langle\psi'^{\Gamma'_2}_{\mathbf{vib3}}|\hat{\mathbf{Q}}^{\mathbf{T_2\,ok}}_{\mathbf{2}\mu}|\psi^{\Gamma_2}_{\mathbf{vib3}}\rangle$ oraz

- **pasma kwadrupolowego** - w każdym przypadku mamy w stanie początkowym i końcowym reprezentację A_1, co oznacza, że elementy macierzowe mają wartość równą zero. Wynika to z reprezentacji otrzymanych z iloczynu Kroneckera, który składa się jedynie z E i T_2;
- **pasm oktupolowych** - zarówno gdy część oktupolowa operatora $\hat{Q}_{2\mu}$ należy do reprezentacji E jak i T_2 iloczyn Kroneckera zawiera Γ'_2. Zatem suma ich może mieć niezerową wartość.

Dla elementu macierzowego $\langle\mathbf{R}^{\mathbf{J'M'}}_{\Gamma'_3}|\mathbf{D}^{\mathbf{2}}_{\mu\mu'}(\mathbf{\Omega})^*|\mathbf{R}^{\mathbf{JM}}_{\Gamma_3}\rangle$ oraz

- **pasma kwadrupolowego** - wartość niezerową można otrzymać w przypadku, gdy $D^2_{\mu\mu'}(\Omega)^*$ należy do reprezentacji E. Zatem jedyną możliwością, gdy otrzymujemy zero jest gdy $\mu' = \pm 1$. Dla pozostałych $\mu' \neq \pm 1$ funkcje sprzężone Wignera rozkładają się na reprezentację E lub/i T_2;
- **pasm oktupolowych** - część rotacyjna, dla każdego wyboru stanów, może dać wartość niezerową.

Zgodnie ze wzorem (364) przejście wzbronione otrzymamy, gdy wszystkie elementy macierzowe dotyczące ruchu wibracyjnego lub rotacyjnego zerują się. Oczywiście może być sytuacja, że zarówno obie części jednocześnie będą miały wartości zerowe. W naszym przypadku dla grupy wewnętrznej $\overline{O}$ otrzymaliśmy, że dla pasma kwadrupolowego jedynym wkładem niezerowym do zredukowanego prawdopodobieństwa przejścia wewnątrzpasmowego są elementy macierzowe dla kwadrupolowych funkcji bazowych. Dla pasm oktupolowych pojawiają się stany dla których elementy macierzowe mogą się zerować, jednak nie wpływa to na wystąpienie przejść wzbronionych. Zatem część wibracyjna, pod względem algebraicznym, nie daje przejść wzbronionych.

Część rotacyjna może dać wartości zerowe dla $\mu' = \pm 1$. Pozostałe składniki sumy mogą mieć wartości różne od zera.

Model o rzeczywistych zmiennych (R). Dla przejść wewnątrzpasmowych otrzymane zostały następujące elementy macierzowe:

$$\langle\psi'|\hat{Q}^{lab}_{2\mu}|\psi\rangle = \sum_{\mu'=-2}^{2}\langle\psi'^{\Gamma'_1}_{vib2}\psi'^{\Gamma'_2}_{vib3}|\hat{Q}_{2\mu'}|\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{\Gamma_2}_{vib3}\rangle\langle R'^{J'M'}_{\Gamma'_3}|D^2_{\mu\mu'}(\Omega)^*|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle. \tag{377}$$

Powyższą sumę możemy rozbić na poszczególne człony, wówczas:

(i) dla $\mu' = \pm 2$ i dowolnego μ otrzymujemy:

$$\begin{aligned}
&\langle\psi'^{\Gamma'_1}_{vib2}\psi'^{\Gamma'_2}_{vib3}|\hat{Q}_{2\pm 2}|\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{\Gamma_2}_{vib3}\rangle\langle R'^{J'M'}_{\Gamma'_3}|D^2_{\mu\pm 2}(\Omega)^*|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle\\
&= \Big\{\langle\psi'^{\Gamma'_1}_{vib2}|\hat{Q}^{A_1;\,kw}_{2\pm 2}|\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\rangle + \langle\psi'^{\Gamma'_1}_{vib2}|\hat{Q}^{B_1;\,kw}_{2\pm 2}|\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\rangle\Big\}\langle\psi'^{\Gamma'_2}_{vib3}|\psi^{\Gamma_2}_{vib3}\rangle\\
&+\langle\psi'^{\Gamma'_1}_{vib2}|\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\rangle\Big\{\langle\psi'^{\Gamma'_2}_{vib3}|\hat{Q}^{A_1;\,ok}_{2\pm 2}|\psi^{\Gamma_2}_{vib3}\rangle + \langle\psi'^{\Gamma'_2}_{vib3}|\hat{Q}^{B_1;\,ok}_{2\pm 2}|\psi^{\Gamma_2}_{vib3}\rangle\Big\}\\
&\times\Big\{\langle R'^{J'M'}_{\Gamma'_3}|(D^2_{\mu\pm 2}(\Omega)^*)_{A_1}|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle + \langle R'^{J'M'}_{\Gamma'_3}|(D^2_{\mu\pm 2}(\Omega)^*)_{B_1}|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle\\
&\qquad+\langle R'^{J'M'}_{\Gamma'_3}|(D^2_{\mu\pm 2}(\Omega)^*)_{E}|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle\Big\}.
\end{aligned} \tag{378}$$

Powyższe wyrażenie w kwadrupolowej części wibracyjnej posiada jeden element macierzowy mogący być różny od zera. Dla oktupolowej części wibracyjnej dla pasma kwadrupolowego mamy identyczną sytuację jak dla zmiennych kwadrupolowych.

Dla pasm oktupolowych oba elementy macierzowe mogą być różne od zera, co wynika z iloczynu Kroneckera jednowymiarowych reprezentacji A_1 i B_1 z dwuwymiarową E, który daje zawsze reprezentację E odpowiadający stanowi końcowemu.

W części rotacyjnej dla pasma kwadrupolowego tylko jeden element macierzowy z $\langle R'^{J'M'}_{\Gamma'_3}|(D^2_{\mu\pm 2}(\Omega)^*)_{A_1}|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle$, $\langle R'^{J'M'}_{\Gamma'_3}|(D^2_{\mu\pm 2}(\Omega)^*)_{B_1}|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle$ może mieć wartość różną od zera. Dla $\langle R'^{J'M'}_{\Gamma'_3}|(D^2_{\mu\pm 2}(\Omega)^*)_{E}|R^{JM}_{\Gamma_3}\rangle$ zawsze otrzymamy zero.

W przypadku pasm oktupolowych każdy z trzech elementów macierzowych może mieć wartość różną od zera. Zatem element macierzowy (378) może być różny od zera z powodu występujących w nim symetrii.

(ii) Dla $\mu' = \pm 1$ i dowolnego μ mamy

$$\langle \psi'^{\Gamma'_1}_{vib2} \psi'^{\Gamma'_2}_{vib3} | \hat{Q}_{2\pm 1} | \psi^{\Gamma_1}_{vib2} \psi^{\Gamma_2}_{vib3} \rangle \langle R'^{J'M'}_{\Gamma'_3} | D^2_{\mu \pm 1}(\Omega)^* | R^{JM}_{\Gamma_3} \rangle$$
$$= \langle \psi'^{\Gamma'_1}_{vib2} | \psi^{\Gamma_1}_{vib2} \rangle \langle \psi'^{\Gamma'_2}_{vib3} | \hat{Q}^{B_2;\, ok}_{2\pm 1} | \psi^{\Gamma_2}_{vib3} \rangle$$
$$\times \Big\{ \langle R'^{J'M'}_{\Gamma'_3} | (D^2_{\mu \pm 1}(\Omega)^*)_{B_2} | R^{JM}_{\Gamma_3} \rangle + \langle R'^{J'M'}_{\Gamma'_3} | (D^2_{\mu \pm 1}(\Omega)^*)_{E} | R^{JM}_{\Gamma_3} \rangle \Big\}. \tag{379}$$

Pomijając część kwadrupolową, która zależy od ortogonalności funkcji początkowej i końcowej mamy, że (379) zeruje się dla pasma kwadrupolowego, w którym oktupolowy stan końcowy należy do A_1 (z iloczynu Kroneckera mamy $B_2 \times A_1 = B_2$ oraz $B_2 \times B_1 = A_2$). Zatem element macierzowy (379) nie daje wkładu do zredukowanego prawdopodobieństwa przejść wewnątrzpasmowych.

Dla pasm oktupolowych mamy $B_2 \times E = E$, więc można otrzymać niezerowe wartości dla tego elementu macierzowego. Zatem dla nieortogonalnych kwadrupolowych funkcji bazowych, może mieć on niezerowy wkład do wartości $B(E2)$.

Dla części rotacyjnej sytuacja jest analogiczna jak dla pasma kwadrupolowego. W przypadku pasma kwadrupolowego oba elementy macierzowe dają zerowe wartości. Dla pasm oktupolowych niezerowy może być jedynie element macierzowy $\langle R'^{J'M'}_{\Gamma'_3} | (D^2_{\mu \pm 1}(\Omega)^*)_{B_2} | R^{JM}_{\Gamma_3} \rangle$. Drugi człon $\langle R'^{J'M'}_{\Gamma'_3} | (D^2_{\mu \pm 1}(\Omega)^*)_{E} | R^{JM}_{\Gamma_3} \rangle$ daje zero, ze względu na rozkład iloczynu Kroneckera dwóch reprezentacji dwuwymiarowych E dający reprezentacje jednowymiarową.

(iii) Dla $\mu' = 0$ i dowolnego μ otrzymujemy:

$$\langle \psi'^{\Gamma'_1}_{vib2} \psi'^{\Gamma'_2}_{vib3} | \hat{Q}_{20} | \psi^{\Gamma_1}_{vib2} \psi^{\Gamma_2}_{vib3} \rangle \langle R'^{J'M'}_{\Gamma'_3} | D^2_{\mu 0}(\Omega)^* | R^{JM}_{\Gamma_3} \rangle$$
$$= \Big\{ \langle \psi'^{\Gamma'_1}_{vib2} | \hat{Q}^{A_1;\, kw}_{20} | \psi^{\Gamma_1}_{vib2} \rangle + \langle \psi'^{\Gamma'_1}_{vib2} | \hat{Q}^{B_1;\, kw}_{20} | \psi^{\Gamma_1}_{vib2} \rangle$$
$$+ \langle \psi'^{\Gamma'_2}_{vib3} | \hat{Q}^{A_1;\, ok}_{20} | \psi^{\Gamma_2}_{vib3} \rangle + \langle \psi'^{\Gamma'_2}_{vib3} | \hat{Q}^{B_1;\, ok}_{20} | \psi^{\Gamma_2}_{vib3} \rangle \Big\}$$
$$\times \Big\{ \langle R'^{J'M'}_{\Gamma'_3} | (D^2_{\mu 0}(\Omega)^*)_{A_1} | R^{JM}_{\Gamma_3} \rangle + \langle R'^{J'M'}_{\Gamma'_3} | (D^2_{\mu 0}(\Omega)^*)_{B_1} | R^{JM}_{\Gamma_3} \rangle \Big\}. \tag{380}$$

Dla elementu macierzowego (380) w części wibracyjnej sytuacja jest identyczna jak dla (378).

W paśmie kwadrupolowym dla części rotacyjnej tylko jeden z elementów macierzowych będzie mógł mieć wartość różną od zera.

W przypadku pasm oktupolowych cała część rotacyjna może mieć wartość niezerową.

Zatem wyrażenie (380) może dać niezerowy wkład do $B(E2)$.

Biorąc sumę (378)-(380) widać, że dla tego modelu nie można otrzymać przejść wzbronionych wynikających jedynie z własności algebraicznych funkcji bazowych stanu początkowego i końcowego.

W dalszej części tego rozdziału będą przedstawione modele, które dość dobrze odtwarzają wartości eksperymentalne pochodzące z [5] (^{a}) oraz z [6] (^{b}):

I_i	I_f	$B(E2 : I_i \to I_f)$ W.u	I_i	I_f	$B(E1 : I_i \to I_f)$ W.u
2^+	0^+	$187(5)\ ^a$	3^-	2^+	$0.98 \times 10^{-3}(21)\ ^a$
4^+	2^+	$263(5)\ ^a$	3^-	4^+	$0.77 \times 10^{-3}(16)\ ^a$
5^-	3^-	$293^{+61,\ a}_{-134}$	5^-	4^+	$0.85 \times 10^{-3}{}^{+0.19,\ a}_{-0.38}$
4^-	2^-	$724^{+483,\ b}_{-322}$	2^-	2^+	$< 0.78 \times 10^{-4,\ b}$
			4^-	4^+	$1.5 \times 10^{-4}{}^{+0.9,\ b}_{-0.7}$

Tablica 10: Wartości eksperymentalne dla ^{156}Gd. Przedstawione wartości pochodzą z [5] (^{a}) oraz z [6] (^{b}).

6.4 Schematy przejść $E2$ i $E1$ w modelu kolektywnym o zmiennych zespolonych

W tym podrozdziale przedstawione są wyniki otrzymane dla kolektywnego modelu o zmiennych zespolonych, dla którego grupą symetryzacji jest $\overline{O}$.

Model ten był pierwszą próbą opisania danych eksperymentalnych z [5] wykorzystując jedynie własności algebraiczne stanów. Wybór deformacji statycznych wchodzących w skład funkcji opisujących stany jest identyczny jak w modelu opisanym w [70]. Ze względu na miejsce występowania niezerowych deformacji statycznych $\mathring{\alpha}_{20}$, $\mathring{\alpha}_{22}$, $\mathring{\alpha}''_{32}$ można wyróżnić dwa modele dla których:

(i) w paśmie kwadrupolowym występują $\mathring{\alpha}_{20}$, $\mathring{\alpha}_{22}$, a w paśmie oktupolowym $\mathring{\alpha}''_{32}$,

(ii) w paśmie kwadrupolowym mamy $\mathring{\alpha}_{20}$, $\mathring{\alpha}_{22}$, natomiast w paśmie oktupolowym $\mathring{\alpha}_{20}$, $\mathring{\alpha}_{22}$, $\mathring{\alpha}''_{32}$.

Dla pierwszego modelu zostały jedynie rozważone dwa pasma: kwadrupolowe i oktupolowe o nieparzystym momencie pędu. Trzecie pasmo, oktupolowe o parzystym momencie pędu, zostało pominięte ze względu na brak potrzebnych wartości eksperymentalnych podczas wykonywania obliczeń. Ze względu na brak danych dotyczących stanów 2^- i 4^- nie było można określić, który wybór stanów dla tego pasma byłby dobry.

W celu polepszenia otrzymywanych wyników, tak aby jak najlepiej odtwarzały dane eksperymentalne [5], został skonstruowany drugi model o zmiennych zespolonych. W trakcie jego konstrukcji zostały już uwzględnione wyniki eksperymentalne uzyskane dla stanów opisujących pasmo oktupolowe o parzystym momencie pędu w jądrze ^{156}Gd, [6].

Ze względu na to, że drugi model lepiej odtwarza przejścia elektromagnetyczne w jądrze ^{156}Gd, konstrukcja trzeciego pasma w pierwszym modelu o zmiennych zespolonych została pominięta. Mimo to pierwszy model był ważny wskazując drogę rozbudowy pasm.

Każdy z wymienionych modeli został uzyskany w następujących krokach:

(1) Korzystając z programów, które napisałam w Mathematice zostały znalezione postacie funkcji bazowych oraz operatorów kwadrupolowego i dipolowego.

(2) Otrzymałam wszystkie możliwe postacie schematów pasm uwzględniające własności algebraiczne stanów, dla których mogą istnieć niezerowe wartości $B(E1)$ i $B(E2)$.

(3) Zostały znalezione parametry opisujące stany oraz wybrane z otrzymanych schematów te, które odtwarzają dane eksperymentalne.

(4) Zostały obliczone przejścia międzypasmowe dla wszystkich możliwych schematów i wybrane te, które najlepiej odtwarzają wartości $B(E2)$ i $B(E1)$ dla pasma kwadrupolowego i oktupolowego o nieparzystym momencie pędu.

(5) W przypadku drugiego modelu o zmiennych zespolonych obliczyłam wartości $B(E1)$ i $B(E2)$ dla oktupolowego pasma o parzystym momencie pędu, a następnie wybrałam z otrzymanych możliwości najbardziej zbliżone do wyników eksperymentalnych [6].

W dalszej części tego rozdziału przedstawione są szczegółowe opisy skonstruowanych modeli.

6.4.1 Model z niezerowymi deformacjami statycznymi w paśmie kwadrupolowym $\mathring{\alpha}_{20}$, $\mathring{\alpha}_{22}$ i w paśmie oktupolowym $\mathring{\alpha}''_{32}$

Następujący wybór niezerowych deformacji statycznych w paśmie kwadrupolowym: $\mathring{\alpha}_{20}$, $\mathring{\alpha}_{22}$ i w paśmie oktupolowym $\mathring{\alpha}''_{32}$ powoduje, że część funkcji automatycznie przynależy do określonej reprezentacji grupy symetryzacji $\overline{O}$ (tabela 7). Ponieważ zakładamy, że stany w części oktupolowej dla pasma kwadrupolowego są zerofononowe i jedynymi deformacjami statycznymi są $\mathring{\alpha}_{20}$, $\mathring{\alpha}_{22}$, więc oktupolowe funkcje bazowe $\psi^{\Gamma_2}_{vib3}(\{\alpha_{3\nu}\})$ należą do reprezentacji symetrycznej $\Gamma_2 = A_1$.

Dla pasma oktupolowego, funkcje opisujące część kwadrupolową są zerofononowe i nie posiadają deformacji statycznych, zatem również należą do reprezentacji A_1. Część oktupolowa, dla tego pasma, jest jednofononowa i posiada statyczną deformację tetraedralną $\mathring{\alpha}''_{32}$, co nie powoduje żadnych ograniczeń nałożonych na reprezentacje do których mogą one należeć. Zatem rozważane w dalszej części stany mają ogólną postać przedstawioną na rysunku 11.

$\psi^{A_1}_{vib,2}\psi^{T_1}_{vib,3}R^{J=5M}_{T_1}$,
$\psi^{A_1}_{vib,2}\psi^{T_2}_{vib,3}R^{J=5M}_{T_2}$
5^-

4^+ $\psi^{E}_{vib,2}\psi^{A_1}_{vib,3}R^{J=4M}_{E}$

$\psi^{A_1}_{vib,2}\psi^{T_1}_{vib,3}R^{J=3M}_{T_1}$,
$\psi^{A_1}_{vib,2}\psi^{T_2}_{vib,3}R^{J=3M}_{T_2}$
3^-

2^+ $\psi^{E}_{vib,2}\psi^{A_1}_{vib,3}R^{J=2M}_{E}$

0^+ $\psi^{A_1}_{vib,2}\psi^{A_1}_{vib,3}R^{J=0M}_{A_1}$

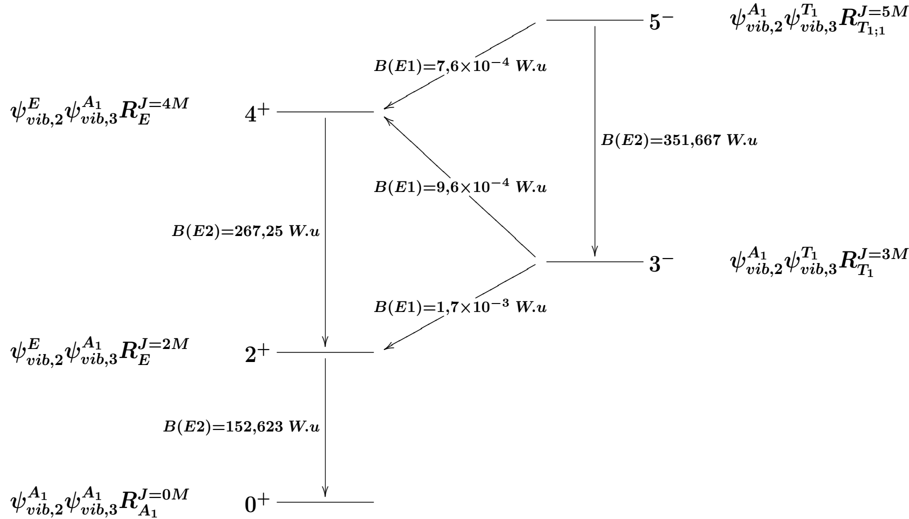
Rysunek 11: Schemat pasm energetycznych cz.1

Schemat przedstawiony na rysunku 11 posiada wszystkie niezerowe przejścia międzypasmowe, co wynika z wcześniejszych rozważań dotyczących $B(E1)$. Uwzględniając istnienie dwóch równoważnych reprezentacji T_1 w części rotacyjnej dla $J = 5$ mamy łącznie 6 możliwych schematów. Do obliczeń potrzebne były następujące parametry: wszystkie deformacje statyczne $\mathring{\alpha}_{20}$, $\mathring{\alpha}_{22}$,

$\mathring{\alpha}''_{32}$, parametry oscylatora η_2 i η_3, promień jądra atomowego r_0 występujący we wzorze na $B(E1)$, $B(E2)$ oraz liczby A i Z. Parametry te, poza kwadrupolowymi deformacjami statycznymi, zostały dopasowane przy wykorzystaniu specjalnie napisanych programów w Fortranie. Szczegółowy opis poszczególnych etapów przedstawiony jest w rozdziale 6.1.

Istotnym parametrem, opisującym wszystkie modele zarówno o zmiennych zespolonych jak i rzeczywistych jest $\eta_\lambda = \sqrt{\frac{B_\lambda \omega_\lambda}{\hbar}}$, który określa odwrotność szerokości potencjału występującego w zmiennych kwadrupolowych $\lambda = 2$ i oktupolowych $\lambda = 3$.

Jak wcześniej zostało wspomniane znalezienie najlepszych schematów do opisu ^{156}Gd polegało na zastosowaniu metody najmniejszych kwadratów dla różnicy wartości przejść opisanych przez funkcje uzyskane z moich programów oraz wartości z [5], przy użyciu powyższych parametrów. Korzystając z [76] przyjęto, że deformacje statyczne mają wartości $\mathring{\alpha}_{22} = 10^{-5}$ i $\mathring{\alpha}_{20} = 0{,}34$. Przy takich założeniach najlepiej odtwarzającym wyniki eksperymentalne [5] jest schemat pasm przedstawiony na rysunku 12.



Rysunek 12: Schemat pasm energetycznych cz.2

Powyższe wyniki są uzyskane dla parametrów:

$$\eta_2 = 12{,}67; \quad \eta_3 = 1{,}00;$$
$$\mathring{\alpha}''_{32} = 0{,}15; \quad r_0 = 1{,}41\,fm. \tag{381}$$

Mimo, że schemat przedstawiony na rysunku 12 wraz z parametrami,

które go opisują jest najlepszym otrzymanym dopasowaniem do wartości eksperymentalnych, to niestety żadne wartości przejść między i wewnątrzpasmowych nie zostały dokładnie odtworzone.

Pojawiło się pytanie jakie wartości $B(E1)$ i $B(E2)$ otrzymamy biorąc te same parametry do innych uzyskanych schematów. Obliczenia zostały zrobione za pomocą napisanych programów symbolicznych, które dawały gotową postać analityczną $B(E1)$ i $B(E2)$ dla dowolnych stanów. Okazało się, że istnieją również jeszcze dwa schematy pasm oktupolowych, które dość dobrze odtwarzają wartości eksperymentalne.

Pierwszym z nich jest model dla którego stany 5^- i 3^- mają odpowiednio postać: $\psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{T_1}R_{T_{1;2}}^{JM}$ i $\psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{T_2}R_{T_2}^{JM}$. W tym przypadku przejścia wewnątrz pasma oktupolowego i międzypasmowe mają wartości:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 5^- \to 3^-) &= 235{,}97\,W.u, \\ B(E1\colon 3^- \to 4^+) &= 0{,}96 \times 10^{-3}\,W.u, \\ B(E1\colon 3^- \to 2^+) &= 0{,}53 \times 10^{-3}\,W.u, \\ B(E1\colon 5^- \to 4^+) &= 0{,}38 \times 10^{-3}\,W.u. \end{aligned} \tag{382}$$

Jak widać przejście $B(E2)$ ma wartość zbliżoną do uzyskanej dla wcześniejszego schematu. Jedynie $B(E1\colon 3^- \to 2^+)$ różni się o jeden rząd wielkości.

Dla kolejnego schematu wartość $B(E2)$ w paśmie oktupolowym jest około dwukrotnie mniejsza niż dla dwóch poprzednich przypadków. Schemat ten składa się ze stanów: $5^-\colon \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{T_1}R_{T_{1;1}}^{JM}$ oraz $3^-\colon \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{T_2}R_{T_2}^{JM}$, dla których wartości przejść wynoszą:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 5^- \to 3^-) &= 168{,}55\,W.u, \\ B(E1\colon 3^- \to 4^+) &= 0{,}96 \times 10^{-3}\,W.u, \\ B(E1\colon 3^- \to 2^+) &= 0{,}53 \times 10^{-3}\,W.u, \\ B(E1\colon 5^- \to 4^+) &= 0{,}76 \times 10^{-3}\,W.u. \end{aligned} \tag{383}$$

W otrzymanych powyżej schematach kwadrupolowe funkcje bazowe opisujące stany pasma oktupolowego oraz stan 0^+ powstały z rzutowania funkcji zerofononowej $u_0(\alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20})u_0(\alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22})$ na reprezentację A_1. Dla stanów 4^+, 2^+ pochodzą one z rzutu wyjściowej funkcji jednofononowej $u_0(\alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20})u_1(\alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22})$.

Otrzymane parametry z metody majmniejszych kwadratów różnią się od standardowych wartości: promień jądrowy $r_0 = 1{,}4fm$ jest większy od jego typowej wartości $r_0 = 1{,}2fm$, poza tym wartość $\eta_3 = 1$ określa dużą szerokość potencjału oktupolowego.

6.4.2 Model z niezerowymi deformacjami statycznymi w paśmie kwadrupolowym $\mathring{\alpha}_{20},\ \mathring{\alpha}_{22}$ i w paśmie oktupolowym $\mathring{\alpha}_{20},\ \mathring{\alpha}_{22},\ \mathring{\alpha}''_{32}$

Model ten, w porównaniu z poprzednim, dopuszcza dodatkowo istnienie deformacji $\mathring{\alpha}_{20},\ \mathring{\alpha}_{22}$ w paśmie oktupolowym. Oznacza to, że reprezentacja dla funkcji $\psi^{\Gamma_1}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22})$ jest dowolna, a zatem liczba możliwych schematów, które mogą być brane pod uwagę jest większa. Schematy, które posiadają niezerowe wartości przejść między i wewnątrzpasmowych zostały przedstawione we wcześniejszym podrozdziale.

Podobnie jak wcześniej, również w tym przypadku zostały wybrane funkcje oraz parametry dla których można najlepiej odtworzyć wyniki eksperymentalne. Schemat postępowania był taki sam jak dla poprzedniego modelu. Korzystając z otrzymanych parametrów istnieją trzy różne pasma oktupolowe mające stany 5^-, 3^-, które mogą posłużyć do opisu ^{156}Gd:

$$
\begin{aligned}
&\text{(i)}\ \ 5^-: \psi^{E}_{vib2}\psi^{T_1}_{vib3}R^{JM}_{T_{1;1}}\ \text{ i }\ \ 3^-:\ \psi^{E}_{vib2}\psi^{T_1}_{vib3}R^{JM}_{T_1},\\
&\text{(ii)}\ \ 5^-: \psi^{E}_{vib2}\psi^{T_1}_{vib3}R^{JM}_{T_{1;1}}\ \text{ i }\ \ 3^-:\ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{T_1}_{vib3}R^{JM}_{T_1},\\
&\text{(iii)}\ \ 5^-: \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{T_1}_{vib3}R^{JM}_{T_{1;1}}\ \text{ i }\ \ 3^-:\ \psi^{E}_{vib2}\psi^{T_1}_{vib3}R^{JM}_{T_1}.
\end{aligned}
$$

Dla każdego ze stanów część kwadrupolowa opisana jest przez zerofononową funkcję bazową. Dla otrzymanych możliwości opisu drugiego pasma widać, że zarówno w części oktupolowej jak i rotacyjnej wektory bazowe należą tylko do jednej reprezentacji trójwymiarowej T_1. Dla stanu 5^- mimo, że mamy do wyboru dwie równoważne reprezentacje T_1 w części rotacyjnej tylko jedna z nich występuje i jest to $T_{1;1}$.

Dla reprezentacji opisującej część oktupolową wzbudzenie pojawia się przy zmiennych α_{30} oraz parami przy $\alpha'_{31},\ \alpha'_{33}$ i $\alpha''_{31},\ \alpha''_{33}$. Każde z trzech miejsc występowania wzbudzenia odpowiada dokładnie jednej funkcji bazowej dla reprezentacji T_1. Jak widać nie ma wzbudzenia przy zmiennej α'_{32} oraz α''_{32}. Dla reprezentacji T_2 zamiast funkcji jednofononowej zależnej od α_{30} pojawia się wzbudzenie przy α'_{32}. Analogicznie jak dla T_1 pozostałe dwa wektory bazowe opisujące niezmienniczą podprzestrzeń określoną przez T_2 posiadają funkcje jednofononowe w zmiennych $\alpha'_{31},\ \alpha'_{33}$ oraz $\alpha''_{31},\ \alpha''_{33}$.

Ze względu na to, że część oktupolowa funkcji jest jednofononowa, więc funkcje zależne od zmiennych kwadrupolowych $\alpha_{20},\ \alpha_{22}$ muszą być funkcjami zerofononowymi oscylatora harmonicznego, [79], zatem mogą jedynie pochodzić z funkcji $u_0(\eta_2,\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20})u_0(\sqrt{2}\eta_2,\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22})$ zrzutowanej na reprezentacje grupy $\overline{O}$.

Ogólny wzór na funkcje oscylatora harmonicznego został również przedstawiony w opisie funkcji (251) oraz w dodatkach B i C.

Otrzymane pasmo kwadrupolowe opisane jest przez następujące stany:

$$\begin{aligned} 4^+ &: \psi^{E}_{vib2}\psi^{A_1}_{vib3}R^{JM}_{E}, \\ 2^+ &: \psi^{E}_{vib2}\psi^{A_1}_{vib3}R^{JM}_{E}, \\ 0^+ &: \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{A_1}_{vib3}R^{JM}_{A_1}. \end{aligned} \tag{384}$$

W przypadku tego pasma opis stanów przez reprezentacje jest identyczny jak dla modelu przedstawionego wcześniej. W paśmie kwadrupolowym jedynym stanem, w którym nie ma wzbudzeń jest stan podstawowy 0^+, który pochodzi z rzutu funkcji $u_0(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20})u_0(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22})$. Pozostałe stany 2^+ i 4^+ pochodzą z funkcji $u_0(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20})u_1(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22})$.

Każdy z trzech możliwych opisów pasm został uzyskany dla następujących parametrów:

$$\begin{aligned} \eta_2 &= 12{,}67; \quad \eta_3 = 11{,}60; \\ \mathring{\alpha}_{22} &= 10^{-5}; \quad \mathring{\alpha}_{20} = 0{,}34; \\ \mathring{\alpha}''_{32} &= 0{,}15; \quad r_0 = 1{,}41\, fm. \end{aligned} \tag{385}$$

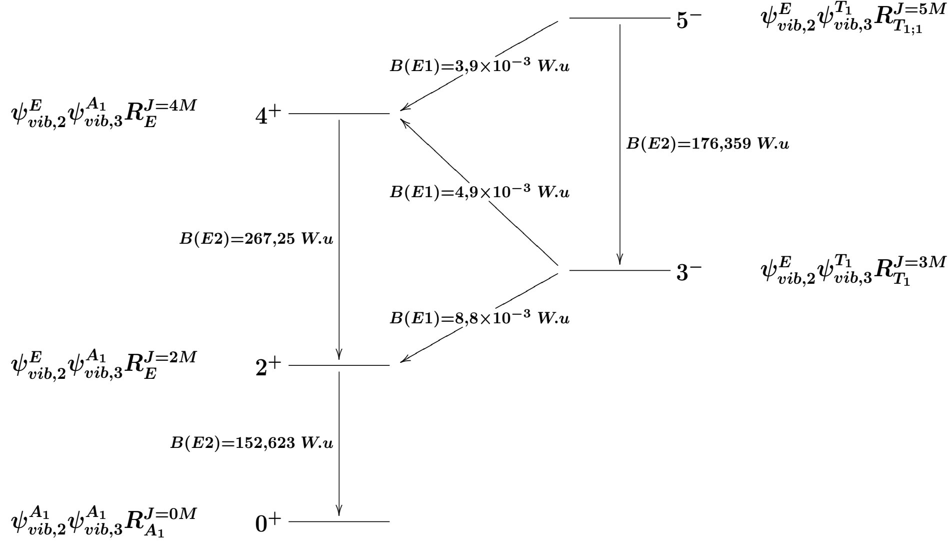
Oprócz kwadrupolowych deformacji statycznych $\mathring{\alpha}_{20}$, $\mathring{\alpha}_{22}$ pozostałe zostały znalezione metodą najmniejszych kwadratów.

Porównując wcześniejszy model nie posiadający kwadrupolowych deformacji statycznych w paśmie oktupolowym z obecnym otrzymujemy, że dodatkowe niezerowe deformacje dają więcej możliwości opisu pasma oktupolowego. Otrzymane dla nich wartości $B(E1)$ i $B(E2)$ przedstawione są na rysunkach 13-15 jako schematy (1), (2) oraz (3).

Korzystając z metody najmniejszych kwadratów zostały policzone różnice wartości eksperymentalnych oraz teoretycznych $B(E1)$ i $B(E2)$ uzyskanych dla dwóch pierwszych pasm. Okazuje się, że najmniejszą wartość χ^2 uzyskuje się dla schematów, w których stany kwadrupolowe $J = 3^-$ i $J = 5^-$ należą do różnych reprezentacji grupy symetryzacji (schemat 2. i 3.). Gorszy wynik otrzymuje się dla schematu, gdzie zarówno stan 3^- i 5^-, w części kwadrupolowej, opisany jest przez tę samą reprezentację dwuwymiarową E (shemat (1)).

Dla dwóch pierwszych pasm otrzymane przejścia międzypasmowe są w większości o jeden rząd większe niż wartości eksperymentalne. Dla $B(E1\colon 3^- \to 2^+)$ w schemacie (2) mamy różnice dwóch rzędów.

Do wybranych trzech schematów zostały dołączone również dwa dodatkowe stany 2^-, 4^-, które tworzą drugie oktupolowe pasmo o parzystości ujemnej. Zakładamy, że stany go opisujące mają takie same parametry jak w paśmie oktupolowym z nieparzystym momentem pędu. Zgodnie z ideą grupy



Rysunek 13: Schemat (1) pasm energetycznych

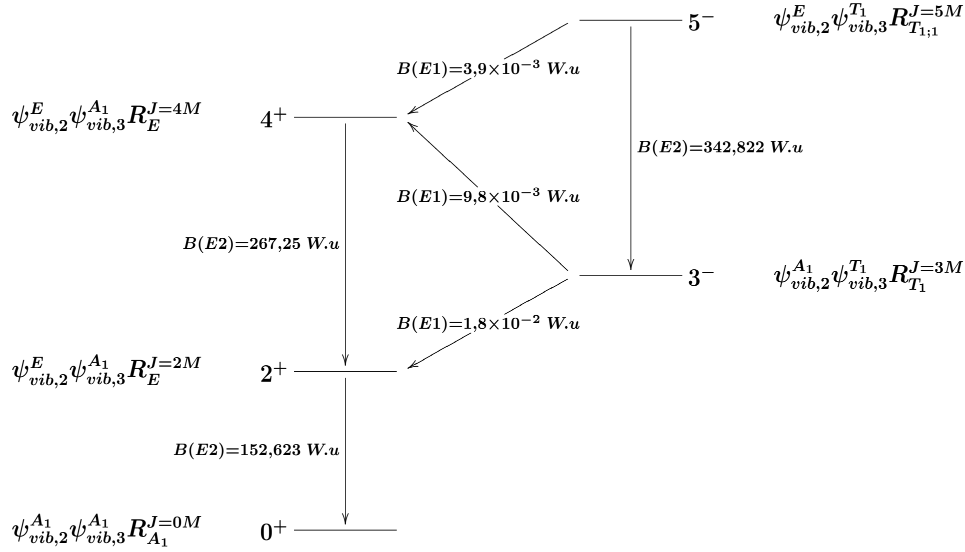
symetryzacji istnieją jedynie następujące funkcje o parzystości ujemnej posiadające moment pędu $J = 2, 4$, dla których przejścia między i wewnątrzpasmowe mają wartość różną od zera:

$$\begin{aligned} 4^- :\ & A_1T_1T_1,\ A_1T_2T_2,\ A_2T_1T_2,\ A_2T_2T_1, \\ & ET_1T_1,\ ET_1T_2,\ ET_2T_1,\ ET_2T_2, \\ 2^- :\ & A_1T_2T_2,\ A_2T_1T_2,\ ET_1T_2,\ ET_2T_2. \end{aligned} \tag{386}$$

Korzystając z napisanego programu zostały policzone wszystkie możliwe wartości $B(E2\colon 4^- \to 2^-)$ uzyskane dla stanów (386). Dla parametrów η_2, η_3, $\mathring{\alpha}_{20}$, $\mathring{\alpha}_{22}$, $\mathring{\alpha}''_{32}$ uzyskanych w omawianym modelu okazało się, że istnieje jedynie 8 schematów opisujących drugie pasmo oktupolowe, dla których wartość $B(E2\colon 4^- \to 2^-)$ jest duża, tabela 11. Niestety porównując otrzymane wyniki z danymi eksperymentalnymi okazuje się, że są one jeszcze kilkukrotnie mniejsze od przedstawionych w [6].

Dla pozostałych stanów 2^-, 4^-, nie umieszczonych w tabeli 11, przejścia $B(E2)$ mają wartości nie przekraczające 5 W.u. Widać zatem, że model ten nie może odtworzyć wartości $B(E2)$ w obrębie trzeciego pasma.

Dodatkowo zostały również obliczone wartości $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ i $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$. Wyniki otrzymane dla parametrów (385) opisujących niezerowe wartości $B(E1)$ przedstawione są w tabelach 12 i 13. Dla przejść mię-



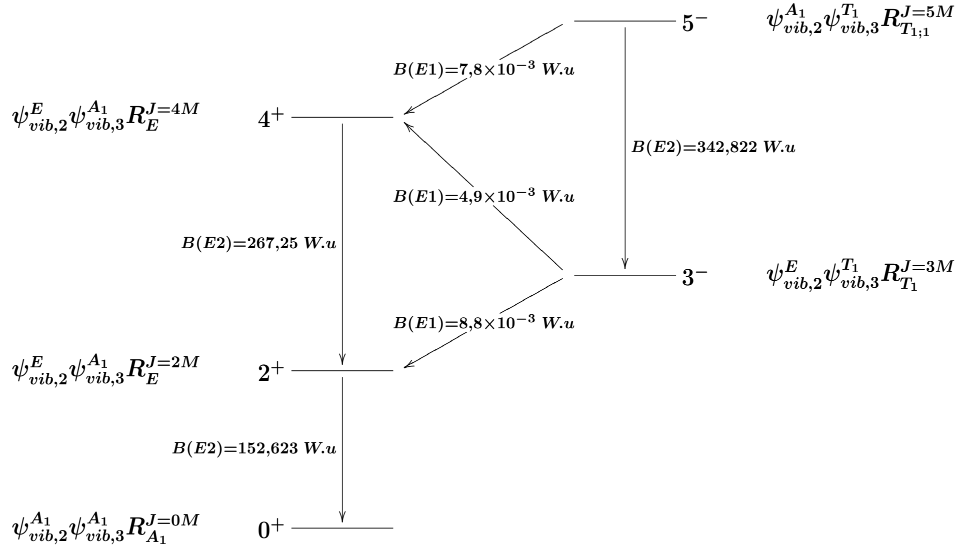
Rysunek 14: Schemat (2) pasm energetycznych

dzypasmowych obliczona wartość $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ jest w większości przypadków o jeden rząd większa niż wartość eksperymentalna, dla $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ otrzymaliśmy co najmniej dwa rzędy większe wartości od przedstawionych w [6].

W przypadku pasma kwadrupolowego i oktupolowego o nieparzystym momencie pędu udało się dość dobrze odtworzyć wyniki eksperymentalne [5]. Uzyskane parametry są zgodne z wielkościami obliczonymi mikroskopowo w [80]. Jedynym wyjątkiem jest promień jądrowy r_0 występujący we wzorze na zredukowane prawdopodobieństwa przejść. Promień ten również był wielkością, która była dopasowywana w metodzie najmniejszych kwadratów jak pozostałe parametry. W przypadku, gdy chcielibyśmy zachować wartości pozostałych parametrów, a przyjąć wartość $r_0 = 1{,}2 fm$, wówczas okazuje się, że wartości zredukowanych przejść $B(E2\colon 4^- \to 2^-)$ są prawie dwukrotnie mniejsze.

6.5 Schematy przejść kwadrupolowych i dipolowych w modelu kolektywnym o zmiennych rzeczywistych

W tej części pracy przedstawione są wyniki otrzymane dla kolektywnego modelu o zmiennych rzeczywistych, dla którego grupą symetryzacji jest $\overline{D}_{4;y}$. Uzyskane schematy, podobnie jak w modelu o zmiennych zespolonych, kon-



Rysunek 15: Schemat (3) pasm energetycznych

struowane były w kilku etapach. W odróżnieniu od wcześniejszego modelu każdy z nich opierał się na moich programach napisanych w języku symbolicznym Mathematica. Pierwszym etapem było znalezienie postaci dwóch pasm: kwadrupolowego o stanach $0^+,\ 2^+,\ 4^+$ i oktupolowego o nieparzystych momentach pędu zbudowanego ze stanów $3^-,\ 5^-$. Parametry opisujące stany zostały znalezione za pomocą metody najmniejszych kwadratów zastosowanej do przejść $B(E2\colon 4^+ \to 2^+)$, $B(E2\colon 2^+ \to 0^+)$ oraz $B(E2\colon 5^- \to 3^-)$ z wykorzystaniem danych eksperymentalnych [5]. Wśród znalezionych parametrów są deformacje statyczne oktupolowe $\mathring{\alpha}_{30},\ \mathring{\alpha}'_{31},\ \mathring{\alpha}'_{32},\ \mathring{\alpha}'_{33}$ oraz $\eta_2,\ \eta_3$ opisujące odpowiednio odwrotność szerokości potencjału dla części kwadrupolowej i oktupolowej. Deformacje oktupolowe były szukane w przedziale od 0,05 do 0,15, a $\eta_2,\ \eta_3$ pomiędzy 0,01 a 20. Przedział dla deformacji oktupolowych związany jest z wcześniejszymi obliczeniami dla ^{156}Gd, podczas których zostały znalezione minima potencjału dla stanów oktupolowych [80]. Ponieważ podczas procedury minimalizacji może pojawić się problem ze znalezieniem minimum globalnego, wynikającego ze skomplikowanej budowy funkcji, minimalizacja dla $\eta_2,\ \eta_3$ jest robiona etapami w mniejszych przedziałach $[0{,}01; 5]$, $[5; 10]$, $[10; 15]$, $[15; 20]$. Dodatkowo, obliczenia robione są przy założeniu, że deformacje dla części kwadrupolowej, zgodnie z danymi z [76], wynoszą $\mathring{\alpha}_{20} = 0,34$, $\mathring{\alpha}_{22} = 10^{-5}$, gdzie wartość dla $\mathring{\alpha}_{22} = 10^{-5}$ przyjmowana jest za małą, ale nie równą zero. W ten sposób oprócz deformacji $\mathring{\alpha}_{20}$ opisującej symetrię osiową w zmiennych kwadrupolwych, istnieje dodatkowo deforma-

stan 4^-	stan 2^-	$\frac{B(E2:\,4^- \to 2^-)}{W.u}$
$A_1T_1T_1$	ET_1T_2	314,253
$A_1T_2T_2$	ET_2T_2	134,68
ET_1T_1	ET_1T_2	157,127
ET_1T_2	ET_1T_2	65,1525
ET_2T_1	$A_1T_2T_2$	314,253
ET_2T_1	ET_2T_2	157,127
ET_2T_2	$A_1T_2T_2$	134,68
ET_2T_2	ET_2T_2	69,5637

Tablica 11: Tabela uzyskanych wartości $B(E2\colon 4^- \to 2^-)$ $W.u.$

stan 4^-	stan 4^+	$\frac{B(E1:\,4^- \to 4^+)}{W.u}$
$A_1T_1T_1$	EA_1E	0,01927
$A_1T_2T_2$		0,00459
ET_1T_1		0,00963
ET_1T_2		0,00413
ET_2T_1		0,00536
ET_2T_2		0,00229

Tablica 12: Tabela uzyskanych wartości $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ $W.u.$

cja nieosiowa $\mathring{\alpha}_{22}$. Oprócz podanych parametrów, w trakcie obliczeń, zostały znalezione również współczynniki stojące przy funkcjach bazowych wchodzących w skład każdego stanu. Uwzględniając wszystkie założenia otrzymuje się łącznie 16 możliwych kombinacji stanów dla dwóch pierwszych pasm. Następnie wśród wszystkich uzyskanych schematów wybierane są te kombinacje, dla których odtwarzane są przejścia $B(E1)$.

W drugim etapie została otrzymana postać trzeciego pasma, pasma oktupolowego o parzystym momencie pędu ze stanami 2^- i 4^-. Podobnie jak wcześniej używana jest metoda najmniejszych kwadratów dla zredukowanego momentu przejścia $B(E2\colon 4^- \to 2^-)$. W próbie odtworzenia trzeciego pasma zostały rozważone dwie możliwości:

(i) parametry opisujące stany dla trzeciego pasma są identyczne jak dla pierwszych dwóch pasm,

stan 2^-	stan 2^+	$\frac{B(E1:\, 2^- \to 2^+)}{W.u}$
$A_1T_2T_2$	EA_1E	0,01529
ET_1T_2		0,01376
ET_2T_2		0,00229

Tablica 13: Tabela uzyskanych wartości $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ $W.u.$

(ii) parametry opisujące stany trzeciego pasma są niezależne.

6.5.1 Model o parametrach dopasowanych tylko do pierwszych dwóch pasm

W tym modelu istnieje 16 schematów opisujących dwa pierwsze pasma energetyczne. W każdym z otrzymanych schematów zostało obliczone zredukowane prawdopodobieństwo znanego eksperymentalnie przejścia $B(E2\colon 4^- \to 2^-)$ poziomów należących do trzeciego pasma. Stany należące do poszukiwanych schematów, które pozwalają otrzymać najlepsze dopasowanie do eksperymentu przedstawione są poniżej:

(i) Schemat 1:

$$\begin{aligned} 0^+ &: \ \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(+);A_1}R_{A_1}^{JM}, & 3^- &: \ \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E}R_{E}^{JM}, \\ 2^+ &: \ \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(+);A_1}R_{A_1}^{JM}, & 5^- &: \ \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E}R_{E}^{JM}. \\ 4^+ &: \ \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(+);A_1}R_{A_1}^{JM}, \end{aligned} \tag{387}$$

Dla tak wybranych stanów mamy następujące wartości parametrów wyznaczonych metodą najmniejszych kwadratów:

$$\begin{aligned} \eta_2 = 0{,}995, &\quad \eta_3 = 12{,}820, \\ \mathring{\alpha}_{30} = 0{,}109, &\quad \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}082, \\ \mathring{\alpha}'_{32} = 0{,}131, &\quad \mathring{\alpha}'_{33} = 0{,}110. \end{aligned} \tag{388}$$

Wartości przejść $B(E2)$ oraz $B(E1)$ są następujące:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^+ \to 2^+) &= 263 W.u, \\ B(E2\colon 2^+ \to 0^+) &= 187 W.u, \\ B(E2\colon 5^- \to 3^-) &= 293 W.u, \end{aligned} \tag{389}$$

oraz

$$\begin{aligned}
B(E1\colon 5^- \to 4^+) &= 1{,}188 \times 10^{-3} W.u,\\
B(E1\colon 3^- \to 4^+) &= 0{,}129 \times 10^{-3} W.u,\\
B(E1\colon 3^- \to 2^+) &= 1{,}097 \times 10^{-3} W.u. \qquad (390)
\end{aligned}$$

Jak widać udało się znaleźć parametry, które dokładnie odtwarzają przejścia $B(E2)$ dla dwóch pierwszych pasm oraz dają dość dobre wartości $B(E1)$.

(ii) Schemat 2:

$$\begin{aligned}
0^+ &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3} R^{JM}_{A_1}, & 3^- &: \ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_{E},\\
2^+ &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3} R^{JM}_{A_1}, & 5^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_{E}.\\
4^+ &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3} R^{JM}_{A_1}, & & \qquad (391)
\end{aligned}$$

W tym przypadku uzyskujemy następujące parametry:

$$\begin{aligned}
\eta_2 &= 1{,}100, & \eta_3 &= 12{,}461,\\
\mathring{\alpha}_{30} &= 0{,}094, & \mathring{\alpha}'_{31} &= 0{,}093,\\
\mathring{\alpha}'_{32} &= 0{,}131, & \mathring{\alpha}'_{33} &= 0{,}106, \qquad (392)
\end{aligned}$$

dla których $B(E2)$ oraz $B(E1)$ wynoszą:

$$\begin{aligned}
B(E2\colon 4^+ \to 2^+) &= 262{,}999 W.u,\\
B(E2\colon 2^+ \to 0^+) &= 187{,}000 W.u,\\
B(E2\colon 5^- \to 3^-) &= 293{,}000 W.u, \qquad (393)
\end{aligned}$$

oraz

$$\begin{aligned}
B(E1\colon 5^- \to 4^+) &= 0{,}219 \times 10^{-3} W.u,\\
B(E1\colon 3^- \to 4^+) &= 0{,}299 \times 10^{-3} W.u,\\
B(E1\colon 3^- \to 2^+) &= 1{,}787 \times 10^{-3} W.u. \qquad (394)
\end{aligned}$$

Dlatego schematu również wartość przejść międzypasmowych są bliskie wartościom otrzymanym w eksperymencie.

Dla schematu 2. istnieją dwie możliwości opisu trzeciego pasma:

(a) pierwsza zawiera następujące stany:

$$\begin{aligned}
2^- &: \ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_{E},\\
4^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_{E}, \qquad (395)
\end{aligned}$$

dla których wartości $B(E2)$ i $B(E1)$ wynoszą:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 724{,}000 W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}687 \times 10^{-2} W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}515 \times 10^{-4} W.u; \end{aligned} \tag{396}$$

(b) w drugiej trzecie pasmo opisane jest przez stany:

$$\begin{aligned} 2^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \\ 4^- &: \ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \end{aligned} \tag{397}$$

dla których mamy:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 724{,}000 W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}240 \times 10^{-1} W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}722 \times 10^{-3} W.u. \end{aligned} \tag{398}$$

Niestety żadne z otrzymanych pasm o parzystym momencie pędu nie daje wartości $B(E1)$ zgodnych z wartościami eksperymentalnymi. Głównie dotyczy to przejścia $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$, którego rząd jest co najmniej dwukrotnie większy niż otrzymany w eksperymencie. Wyliczone wartości przejścia $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ są bardziej zbliżone do eksperymentalnych jednak również tutaj nie ma zgodności co do rzędu. Jak widać udało się dobrze odtworzyć przejście $B(E2)$ zachowując te same parametry jakie zostały otrzymane dla pierwszych dwóch pasm.

Dla schematu 1. mamy również dwie możliwości wyboru trzeciego pasma, które odtwarzają wartość $B(E2\colon 4^- \to 2^-) = 724 W.u$:

(a) pierwsza możliwość obejmuje stany:

$$\begin{aligned} 2^- &: \ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \\ 4^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \end{aligned} \tag{399}$$

gdzie wartości $B(E1)$ są następujące:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 723{,}999 W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}327 \times 10^{-3} W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}946 \times 10^{-4} W.u; \end{aligned} \tag{400}$$

(b) w drugim przypadku rozważane są stany postaci:

$$\begin{aligned} 2^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \\ 4^- &: \ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \end{aligned} \tag{401}$$

dla których otrzymujemy:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 724{,}000 W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}229 \times 10^{-1} W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}148 \times 10^{-3} W.u. \end{aligned} \tag{402}$$

Z przedstawionych możliwości pasmo postaci (399) najlepiej odtwarza wartości eksperymentalne $B(E1)$. W drugim wyborze trzeciego pasma również pojawia się problem z odtworzeniem wartości przejścia $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$, które jest o trzy rzędy za duże od wartości eksperymentalnej. Otrzymane wartości $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ są podobnie jak dla schematu 2. do dwóch rzędów większe od eksperymentalnych.

W podanych powyżej przykładach wartość η_2 wynosi około 1. W porównaniu z wartościami otrzymanymi dla $\eta_3 > 12$, są one małe. Oznacza to,że jądro ^{156}Gd byłoby „miększe" w kierunku drgań kwadrupolowych niż oktupolowych, co wydaje się być niefizyczne. Rachunki mikroskopowe sugerują η_2 i η_3 w pobliżu 10, co daje kilka razy mniejsze wartości $B(E2\colon 4^- \to 2^-)$ w porównaniu z eksperymentem.

Tę sytuację opisuje przedstawiony poniżej schemat 3., dla którego otrzymano trzy zbiory parametrów odtwarzające dość dobrze wartości eksperymentalne dla dwóch pierwszych pasm. W każdym z tych przypadków istnieją cztery różne struktury stanów dla pasma trzeciego.

Stany dla schematu 3. opisane są przez następujące funkcje:

$$\begin{aligned} 0^+ &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{JM}_{A_1}, & 3^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \\ 2^+ &: \ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{JM}_{B_1}, & 5^- &: \ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \\ 4^+ &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{JM}_{A_1}, \end{aligned} \tag{403}$$

dla których przejścia wewnątrzpasmowe mają wartości zgodne z eksperymentalnymi:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^+ \to 2^+) &= 263 W.u, \\ B(E2\colon 2^+ \to 0^+) &= 187 W.u, \\ B(E2\colon 5^- \to 3^-) &= 293 W.u. \end{aligned} \tag{404}$$

W tym przypadku mamy kilka możliwych zbiorów parametrów:

(i) pierwszy zbiór wybranych parametrów:

$$\begin{aligned} &\eta_2 = 10{,}641 \quad \eta_3 = 13{,}103, \\ &\mathring{\alpha}_{30} = 0{,}111 \quad \mathring{\alpha}_{31} = 0{,}099, \\ &\mathring{\alpha}_{32} = 0{,}108 \quad \mathring{\alpha}_{33} = 0{,}110, \end{aligned} \tag{405}$$

dla których otrzymujemy następujące wartości $B(E1)$, które są zbliżone otrzymanych w eksperymencie:

$$\begin{aligned} B(E1\colon 5^- \to 4^+) &= 0{,}146 \times 10^{-3} W.u, \\ B(E1\colon 3^- \to 4^+) &= 0{,}212 \times 10^{-3} W.u, \\ B(E1\colon 3^- \to 2^+) &= 0{,}262 \times 10^{-4} W.u. \end{aligned} \tag{406}$$

Jak było wspomniane wcześniej istnieją cztery możliwości zbudowania trzeciego pasma dla parametrów (405):

(a) jeżeli stany dla pasma o parzystym momencie pędu są następujące:

$$\begin{aligned} 2^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \\ 4^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \end{aligned} \tag{407}$$

to odpowiadającymi wartościami zredukowanych prawdopodobieństw przejść $B(E2)$, $B(E1)$ są:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 76{,}179 W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}104 \times 10^{-3} W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}216 \times 10^{-10} W.u. \end{aligned} \tag{408}$$

Otrzymana wartość $B(E2)$ jest około 9 razy mniejsza od wartości eksperymantalnej, a otrzymana wartość $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ jest o dwa rzędy większa. Natomiast $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ mieści się w przedziale niepewności otrzymanym w eksperymencie;

(b) jeżeli stany pasma trzeciego mają postać:

$$\begin{aligned} 2^- &: \ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \\ 4^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \end{aligned} \tag{409}$$

to otrzymane $B(E2)$, $B(E1)$ mają następujące wartości:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 141{,}308 W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}686 \times 10^{-3} W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}160 \times 10^{-2} W.u. \end{aligned} \tag{410}$$

W tym przypadku wartość $B(E2)$ jest około 5 razy mniejsza niż otrzymana w eksperymencie. Dla $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ i $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ mamy wartości o dwa rzędy większe;

(c) wybierając stany pasma trzeciego w postaci:

$$\begin{aligned} 2^- &: \quad \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(-);E} R_E^{JM}, \\ 4^- &: \quad \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E} R_E^{JM} \end{aligned} \tag{411}$$

otrzymujemu następujące wartości $B(E2)$ i $B(E1)$:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 141{,}308 W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}169 \times 10^{-8} W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}640 \times 10^{-8} W.u. \end{aligned} \tag{412}$$

Dla $B(E2)$ mamy sytuację identyczną jak poprzednia. W przypadku $B(E1)$ zostały otrzymane bardzo małe wartości i jedynie $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ mieści się w przedziale niepewności otrzymanym w eksperymencie;

(d) podobnie wybierając stany pasma trzeciego jako:

$$\begin{aligned} 2^- &: \quad \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E} R_E^{JM}, \\ 4^- &: \quad \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E} R_E^{JM} \end{aligned} \tag{413}$$

wartościami $B(E2)$ i $B(E1)$ są:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 89{,}463 W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}398 \times 10^{-9} W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}246 \times 10^{-3} W.u. \end{aligned} \tag{414}$$

Wartość $B(E2)$ jest około 8 razy mniejsza, zaś dla $B(E1)$ otrzymujemy różnicę w wielkości rzędów względem wartości eksperymentalnej;

(ii) drugim zbiorem otrzymanych parametrów jest:

$$\begin{aligned} \eta_2 &= 9{,}902 \quad \eta_3 = 13{,}792, \\ \mathring{\alpha}_{30} &= 0{,}106 \quad \mathring{\alpha}_{31} = 0{,}099, \\ \mathring{\alpha}_{32} &= 0{,}090 \quad \mathring{\alpha}_{33} = 0{,}123. \end{aligned} \tag{415}$$

Dla powyższych wartości otrzymujemy zgodność co do rzędu z wartościami eksperymentalnymi:

$$\begin{aligned} B(E1\colon 5^- \to 4^+) &= 0{,}168 \times 10^{-3} W.u, \\ B(E1\colon 3^- \to 4^+) &= 0{,}103 \times 10^{-3} W.u, \\ B(E1\colon 3^- \to 2^+) &= 0{,}165 \times 10^{-3} W.u. \end{aligned} \tag{416}$$

Dla parametrów (415) trzecie pasmo może mieć budowę odpowiadającą jednej z możliwości:

(a) stany pasma o parzystym momencie pędu:

$$\begin{aligned} 2^- &: \quad \psi^{A_1}_{vib2} \psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \\ 4^- &: \quad \psi^{A_1}_{vib2} \psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E. \end{aligned} \tag{417}$$

Wartości zredukowanych prawdopodobieństw przejść $B(E2)$ i $B(E1)$ są następujące:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 75{,}671 W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}776 \times 10^{-7} W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}113 \times 10^{-3} W.u. \end{aligned} \tag{418}$$

W tym przypadku $B(E2)$ jest około 9 razy mniejsza od wartości eksperymentalnej. Dla otrzymanych przejść międzypasmowych mamy dla $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ o 2 rzędy wartość mniejszą, a dla $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ o rząd większą od otrzymanej w eksperymencie;

(b) gdy stany pasma trzeciego mają postać:

$$\begin{aligned} 2^- &: \quad \psi^{B_1}_{vib2} \psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \\ 4^- &: \quad \psi^{A_1}_{vib2} \psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \end{aligned} \tag{419}$$

wówczas wartości $B(E2)$ i $B(E1)$ wynoszą:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 141{,}308 W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}610 \times 10^{-7} W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}960 \times 10^{-7} W.u. \end{aligned} \tag{420}$$

Wartość $B(E2)$ jest około 5 razy mniejsza, a $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ jest o dwa rzędy mniejsza od eksperymentalnej. Jedynie wartość $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ mieści się przedziale niepewności;

(c) dla stanów:

$$\begin{aligned} 2^- &: \quad \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E, \\ 4^- &: \quad \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E. \end{aligned} \tag{421}$$

$B(E2)$ i $B(E1)$ mają następujące wartości:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 141{,}308 W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}756 \times 10^{-9} W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}242 \times 10^{-8} W.u. \end{aligned} \tag{422}$$

Wartość $B(E2)$ jest w przybliżeniu 5 razy mniejsza, a $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ jest o cztery rzędy mniejsza od eksperymentalnej. Wartość $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ mieści się przedziale niepewności;

(d) gdy rozważamy stany:

$$\begin{aligned} 2^- &: \quad \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E, \\ 4^- &: \quad \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E, \end{aligned} \tag{423}$$

wówczas wartości dla $B(E2)$ oraz $B(E1)$ wynoszą:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 87{,}769 W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}154 \times 10^{-4} W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}152 \times 10^{-3} W.u. \end{aligned} \tag{424}$$

W tym przypadku $B(E2)$ jest około 8 razy mniejsza, zaś $B(E1)$ różnią się o jeden rząd od wartości eksperymentalnej;

(iii) trzeci zbiór parametrów opisujących pierwsze pasma ma postać:

$$\begin{aligned} \eta_2 &= 10{,}655 & \eta_3 &= 6{,}932, \\ \mathring{\alpha}_{30} &= -0{,}034 & \mathring{\alpha}_{31} &= -0{,}068, \\ \mathring{\alpha}_{32} &= -0{,}415 & \mathring{\alpha}_{33} &= -0{,}080. \end{aligned} \tag{425}$$

Dla paramatrów (425) mamy następujące zredukowane prawdopodobieństwa przejść dipolowych:

$$\begin{aligned} B(E1\colon 5^- \to 4^+) &= 0{,}326 \times 10^{-3} W.u, \\ B(E1\colon 3^- \to 4^+) &= 0{,}380 \times 10^{-3} W.u, \\ B(E1\colon 3^- \to 2^+) &= 0{,}666 \times 10^{-3} W.u. \end{aligned} \tag{426}$$

Przedstawione powyżej wartości $B(E1)$ zgadzają się co do rzędu z wartościami eksperymentalnymi.

Również dla ostatniego zbioru parametrów (425) oktupolowe pasmo o parzystym momencie pędu można zbudować na cztery sposoby:

(a) dla stanów postaci:

$$\begin{aligned} 2^- : \quad & \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \\ 4^- : \quad & \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E} \end{aligned} \tag{427}$$

wartości zredukowanych prawdopodobieństw przejść $B(E2)$ i $B(E1)$ wynoszą:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 77{,}828 W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}146 \times 10^{-9} W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}250 \times 10^{-9} W.u. \end{aligned} \tag{428}$$

Jedynie wartość $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ mieści się przedziale niepewności otrzymanym w eksperymencie. Pozostałe wartości są za małe: $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ o cztery rzędy, a $B(E2\colon 4^- \to 2^-)$ o 9 razy;

(b) gdy stany mają postać:

$$\begin{aligned} 2^- : \quad & \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \\ 4^- : \quad & \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \end{aligned} \tag{429}$$

wówczas wartościami $B(E2)$ i $B(E1)$ są:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 141{,}308 W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}197 \times 10^{-9} W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}457 \times 10^{-9} W.u. \end{aligned} \tag{430}$$

Wartość $B(E2)$ jest o 5 razy, zaś $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ o cztery rzędy miejsza od wartości eksperymentalnej. W rozważanym przypadku wartość $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ mieści się w przedziale niepewności;

(c) przyjmując stany w postaci:

$$\begin{aligned} 2^- : \quad & \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \\ 4^- : \quad & \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E} \end{aligned} \tag{431}$$

otrzymujemy następujące wartości $B(E2)$ oraz $B(E1)$:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 141{,}308 W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}120 \times 10^{-9} W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}136 \times 10^{-8} W.u. \end{aligned} \tag{432}$$

Mamy identyczną sytuację jak dla powyższego wyboru stanów dla trzeciego pasma;

(d) dla stanów:

$$\begin{aligned}
2^- :&\quad \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E,\\
4^- :&\quad \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E
\end{aligned}\tag{433}$$

wartości $B(E2)$, $B(E1)$ wynoszą:

$$\begin{aligned}
B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 91{,}235 W.u,\\
B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}754 \times 10^{-10} W.u,\\
B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}213 \times 10^{-7} W.u.
\end{aligned}\tag{434}$$

Otrzymana wartość $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ zawiera się w przedziale niepewności. Pozostałe wartości są za małe: odpowiednio $B(E2\colon 4^- \to 2^-)$ i $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ o około 8 razy i o pięć rzędów.

W schemacie 3., mimo, że wartości η_2 i η_3 są zbliżone, to nie udało się odtworzyć przejść między i wewnątrzpasmowych dla pasma trzeciego.

Analiza otrzymanych wyników dla omawianego wyżej modelu. W tej części przedstawiona jest analiza opisanych wcześniej schematów. Oparta jest ona głównie na otrzymanym rozkładzie prawdopodobieństwa orientacji momentu pędu oraz prawdopodobieństwie z jakim wchodzą funkcje bazowe w skład danego stanu. Wyniki przedstawione są w tabelach, gdzie w kolumnie „stan" wpisany jest stan, którego dotyczą dane przedstawione w dalszych kolumnach. W kolumnie „schemat" podane są numery schematu, którego dotyczą przedstawione wyniki.

Proponowany podział wynika ze sposobu jak odtwarzane jest przejście wewnątrzpasmowe dla trzeciego pasma.

W kolumnie „wzbudzenie dla funkcji początkowej" wypisane są zmienne, przy których znajduje się wzbudzenie w funkcji początkowej, z której uzyskano funkcję bazową dającą największe prawdopodobieństwo wkładu do danego stanu. Ponieważ wzbudzenie to występuje jedynie w części opisującej wibracje, zatem kolumna ta posiada dwie podkolumny dotyczące funkcji określającej wibracje w części kwadrupolowej oraz oktupolowej.

Ostatnia kolumna „główne osie rozkładu prawdopodobieństwa momentu pędu" opisuje rotacyjną funkcję bazową. Funkcja ta jest częścią funkcji dającej największe prawdopodobieństwo wkładu do danego stanu. W tej kolumnie przedstawione są kierunki główne orientacji momentu pędu dla tej funkcji bazowej.

Ze względu na sposób otrzymywania pasm energetycznych tabele dla każdego ze schematów dzielą się na opisujące dwa pierwsze pasma otrzymane razem: kwadrupolowe i oktupolowe o nieparzystym momencie pędu oraz osobno

przedstawione są wyniki otrzymane dla trzeciego pasma oktupolowego o parzystym momencie pędu.

Dla funkcji początkowych opisujących ruch wibracyjny kwadrupolowy i oktupolowy mamy następujące możliwości wzbudzenia:

Kwadrupolowe funkcje początkowe nie posiadające wzbudzenia:

$$u_0\big(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20})u_0(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22}\big) \tag{435}$$

po zrzutowaniu na reprezentację grupy symetryzacji $\overline{D}_{4;y}$ również nie posiadają żadnych wzbudzeń.

Zgodnie z wcześniejszymi oznaczeniami mamy, że $u_n(\eta, x) = \sqrt{\frac{\eta}{\sqrt{\pi}2^n n!}} \times \exp(-\frac{1}{2}\eta^2 x^2)H_n(\eta x)$, gdzie $H_n(\eta x)$ jest wielomianem Hermite'a, [79].

Kwadrupolowe funkcje początkowe mające zbudzenie stojące przy zmiennej albo α_{20} albo α_{22}:

$$u_1\big(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20})u_0(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22}\big), \tag{436}$$

$$u_0\big(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20})u_1(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22}\big). \tag{437}$$

Po zrzutowaniu dają one funkcje bazowe składające się z kombinacji liniowych trzech funkcji posiadających wzbudzenie przy zmiennych α_{20} i α_{22}. Deformacje statyczne dla tych funkcji wynoszą $\mathring{\alpha}_{20}$, $\mathring{\alpha}_{22}$ albo są kombinacjami liniowymi $\mathring{\alpha}_{20}$ i $\mathring{\alpha}_{22}$.

Oktupolowe funkcje początkowe posiadające wzbudzenie:

(i) Przy zmiennej $\boldsymbol{\alpha_{30}}$:

$$\begin{aligned} &u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big) \\ &\times u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big)u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big), \end{aligned} \tag{438}$$

gdzie po zrzutowaniu tej funkcji początkowej na reprezentacje A_1, A_2, B_1, B_2 oraz E otrzymane zostały funkcje składające się z kombinacji liniowych iloczynów czterech funkcji oktupolowych zależnych od α_{30}, α'_{31}, α'_{32}, α'_{33}. Wzbudzenia pojawiają się przy jednej ze zmiennych α_{30}, α'_{31} lub α'_{33}. W przypadku, gdy wzbudzenie jednofononowe pojawia się przy zmiennej α_{30}, wówczas deformacje statyczne mają wartości ze zbioru $\{\pm\mathring{\alpha}_{30},\ \pm\mathring{\alpha}'_{31},\ \pm\mathring{\alpha}'_{32},\ \pm\mathring{\alpha}'_{33}\}$. Dla pozostałych funkcji tworzących otrzymaną funkcję bazową przy wzbudzeniu jednofononowym deformacje statyczne zbudowane są z kombinacji $\mathring{\alpha}_{30}$ i $\mathring{\alpha}'_{32}$.

(ii) Przy zmiennej α'_{31}:

$$u_0(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}) u_1(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31})$$
$$\times u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}) u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}). \qquad (439)$$

Po zrzutowaniu na reprezentacje grupy symetryzacji $\overline{D}_{4;y}$ otrzymujemy funkcje bazowe, gdzie wzbudzenie jednofononowe pojawia się dla zmiennej α'_{31}, przy deformacjach posiadających jedną z wartości ze zbioru $\{\pm\mathring{\alpha}_{30},\ \pm\mathring{\alpha}'_{31},\ \pm\mathring{\alpha}'_{32},\ \pm\mathring{\alpha}'_{33}\}$. W przypadku, gdy deformacje są kombinacjami dwóch wartości $\mathring{\alpha}'_{31}$ i $\mathring{\alpha}'_{33}$, wówczas wzbudzenie pojawia się w funkcjach zależnych od zmiennej α_{30} lub przy α'_{32}.

(iii) Przy zmiennej α'_{32}:

$$u_0(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}) u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31})$$
$$\times u_1(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}) u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}). \qquad (440)$$

W przypadku tej funkcji sytuacja jest analogiczna jak dla funkcji uzyskanych z (438). Różnica pomiędzy tymi przypadkami dotyczy jedynie występowania wzbudzenia w funkcjach, gdzie deformacje statyczne są opisane z dokładnością do znaku przez jedną z wartości: $\mathring{\alpha}_{30}$, $\mathring{\alpha}'_{31}$, $\mathring{\alpha}'_{32}$, $\mathring{\alpha}'_{33}$. Dla funkcji bazowej otrzymanej z (440) mamy takie wzbudzenie dla zmiennej teraedralnej α'_{32}.

(iv) Przy zmiennej α'_{33}:

$$u_0(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}) u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31})$$
$$\times u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}) u_1(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}) \qquad (441)$$

funkcje otrzymane po zrzutowaniu (441) mają budowę analogiczną do (439). Różnica polega jedynie w występowaniu wzbudzenia jednofononowego w funkcjach posiadających deformacje statyczne opisane przez jedną z wartości: $\{\pm\mathring{\alpha}_{30},\ \pm\mathring{\alpha}'_{31},\ \pm\mathring{\alpha}'_{32},\ \pm\mathring{\alpha}'_{33}\}$. Dla tych funkcji wzbudzenie pojawia się przy zmiennej α'_{33}.

Dokładna postać wszystkich otrzymanych funkcji bazowych jest przedstawiona w dodatku C.

Rozkład prawdopodobieństwa wkładu wszystkich funkcji bazowych dla poszczególnych stanów z przedstawionych schematów znajdują się w dodatku E. Opis jak wygląda graficznie rozkład prawdopodobieństwa orientacji momentu pędu znajduje się w podrozdziale 6.2.5 opisującym część rotacyjną funkcji bazowych.

Dla dwóch pierwszych schematów, 1. i 2., mamy dokładne odtworzenie wartości eksperymentalnej dla przejścia $B(E2\colon 4^- \to 2^-)$. Cechy opisujące funkcje bazowe dające największe prawdopodobieństwo wkładu do każdego ze stanu są przedstawione w tabeli 14. Wynika z niej, że dla pasma kwadrupolowego prawie wszystkie funkcje, dające największe prawdopodobieństwo wkładu do określonego stanu, posiadają wzbudzenie pojawiające się przy każdej zmiennej kwadrupolowej. Dodatkowo głównymi osiami rozkładu prawdopodobieństwa dla kierunku momentu pędu są OX i OZ.

Dla pasma oktupolowego o nieparzystym momencie pędu, z rozkładu prawdopodobieństwa dla części rotacyjnej, mamy dodatkowo oś OY jako główny kierunek orientacji momentu pędu. Dla stanu 3^- pojawiają się dwie funkcje bazowe mające największy wkład do tego stanu, zatem wzbudzenia w części wibracyjnej pochodzą z dwóch funkcji początkowych. Dla stanu 5^- tylko jedna z funkcji bazowych daje istotnie większy wkład do tego stanu, a wzbudzenie dla schematu 1 i 2 pojawiają się odpowiednio dla zmiennych α_{30}, α'_{32}, α'_{33} oraz α'_{31}, α'_{32}, α'_{33}.

stan	schemat	wzbudzenie dla funkcji początkowej		główne osie rozkładu prawd. momentu pędu
		kwadrupolowej	oktupolowej	
2^+	1	α_{20}	-	OX, OZ
	2	-	-	OX, OZ
4^+	1	α_{20}	-	OY
	2	α_{22}	-	OX, OZ
3^-	1	-	α_{30}, α'_{33}	OX, OY, OZ
	2	-	α'_{31}, α'_{33}	OX, OY, OZ
5^-	1	-	α'_{33}	OX, OY, OZ
	2	-	α'_{32}	OY

Tablica 14: Opis funkcji bazowych dla schematu 1. i 2., pasmo 1 i 2 opis funkcji bazowych dających największe prawdopodobieństwo wkładu do stanów dla pierwszych dwóch pasm schematów 1 i 2.

Dla przejścia $B(E2\colon 4^- \to 2^-)$, dla którego stanami początkowymi i końcowymi są odpowiednio:

$$\begin{aligned} 4^-\colon & \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E, \\ 2^-\colon & \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E, \end{aligned} \tag{442}$$

albo

$$\begin{aligned} 4^- &: \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E, \\ 2^- &: \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E, \end{aligned} \tag{443}$$

wzbudzenia w części wibracyjnej pochodzą od tej samej funkcji początkowej, dla której wzbudzenie znajduje się przy zmiennej α_{30}. Oznacza to, że w funkcji bazowej wzbudzenia pojawiają się przy zmiennych α_{30}, α'_{31}, α'_{33}. Dla części rotacyjnej funkcje bazowe dające największy wkład do stanów oktupolowych o parzystym momencie pędu posiadają dwa główne kierunki rozkładu prawdopodobieństwa orientacji momentu pędu i są to osie: OX i OZ. Przedstawiony opis funkcji bazowych dający największy wkład do opisu stanów trzeciego pasma dla schematu 1. i 2. przedstawiony jest w tabeli 15.

stan	schemat	wzbudzenie dla funkcji początkowej		główne osie rozkładu prawd. momentu pędu
		kwadrupolowej	oktupolowej	
2^-	1	-	α_{30}	OX, OZ
	2	-	α_{30}	OX, OZ
4^-	1	-	α_{30}	OX, OZ
	2	-	α_{30}	OX, OZ

Tablica 15: Opis funkcji bazowych dla schematu 1. i 2., pasmo 3 opis funkcji bazowych dających największe prawdopodobieństwo wkładu do stanów dla pasma trzeciego dla schematów 1 i 2.

Dla schematu 3. pasmo kwadrupolowe głównie zbudowane jest z funkcji bazowych, które nie zawierają żadnego wzbudzenia, a główny kierunek rozkładu prawdopodobieństwa orientacji momentu pędu jest zgodny z osią OY. Dla oktupolowego pasma o nieparzystym momencie pędu schemat 3 opisany jest głównie przez jednofononowe funkcje utworzone z funkcji mających jedno wzbudzenie występujące w funkcjach zależnych od jednej ze zmiennych α_{30}, α'_{31}, α'_{33}, a głównym kierunkiem dla momentu pędu jest oś OY.

Przedstawiony powyżej opis uzyskanych modeli znajduje się w tabeli 16[8].

W trzecim paśmie schemat i trochę różni się funkcjami opisującymi część wibracyjną i rotacyjną, dającymi największy wkład w stany 4^-, 2^-. Ponieważ wartość $B(E2\colon 4^- \to 2^-)$ dla każdego z trzech schematów nie była

[8]Schemat *i* dotyczy parametrów $\eta_2 = 10{,}6410, \eta_3 = 13{,}1026$, *ii* parametrów $\eta_2 = 9{,}9022, \eta_3 = 13{,}7924$ a *iii* parametrów $\eta_2 = 10{,}6548, \eta_3 = 6{,}9317$.

stan	schemat	wzbudzenie dla funkcji początkowej		główne osie rozkładu prawd. momentu pędu
		kwadrupolowej	oktupolowej	
2^+	i, ii, iii	-	-	OY
4^+	i, ii, iii	-	-	OY
3^-	i	-	$\alpha_{30},\ \alpha'_{31},\ \alpha'_{33}$	OX, OY, OZ
	ii, iii	-	α'_{31}	OY
5^-	i	-	α_{30}	skośne
	iii	-	α'_{31}	OY
	ii	-	α'_{31}	OY

Tablica 16: Opis funkcji bazowych dla schematu 3.
opis funkcji bazowych dających największe prawdopodobieństwo wkładu do stanów pierwszych dwóch pasm schematu 3.

odtworzona przez proponowany schemat, poniżej są przedstawione wszystkie możliwe kombinacje stanów tego pasma.

Ze względu na reprezentacje, do których mogą należeć funkcje bazowe mamy cztery opisy pasma trzeciego:

(a) Dla oktupolowego pasma o parzystym momencie pędu opisanego przez stany:

$$\begin{aligned} 4^- &: \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \\ 2^- &: \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}. \end{aligned} \tag{444}$$

Dla przedstawionego schematu część wibracyjna głównie pochodzi z funkcji początkowej mającej wzbudzenie w zmiennej α_{30}, co oznacza występowanie wzbudzenia w funkcji bazowej przy zmiennych $\alpha_{30},\ \alpha'_{31},\ \alpha'_{33}$. Część rotacyjna opisana jest przez moment pędu mający największy wkład w kierunku osi OX i OZ. Opis funkcji dających największy wkład do stanów trzeciego pasma przedstawiony jest w tabeli 17.

(b) Wyniki dla oktupolowego pasma o parzystym momencie pędu opisane przez stany:

$$\begin{aligned} 4^- &: \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \\ 2^- &: \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}. \end{aligned} \tag{445}$$

Dla tak wybranych funkcji bazowych w schematach ii oraz iii część wibracyjna głównie pochodzi z funkcji początkowej mającej wzbudzenie w

stan	schemat	wzbudzenie dla funkcji początkowej		główne osie rozkładu prawd. momentu pędu
		kwadrupolowej	oktupolowej	
2^-	i	-	α'_{33}	OX, OZ
	iii	-	α_{30}	OX, OZ
	ii	-	$\alpha_{30},\ \alpha'_{33}$	OX, OZ
4^-	i	-	α'_{33}	OX, OZ, skośne
	iii	-	α_{30}	OX, OZ, skośne
	ii	-	α_{30}	OX, OZ

Tablica 17: Opis funkcji bazowych dla schematu 3, pasmo 3., cz.1
opis funkcji bazowych dających największe prawdopodobieństwo wkładu do stanów trzeciego pasma schematu 3, cz.1.

zmiennej α'_{31}, dla modelu i: α_{30}. Oznacza to, że pojawia się ono w funkcjach bazowych zależnych odpowiednio od zmiennych: $\alpha_{30},\ \alpha'_{31},\ \alpha'_{32}$ oraz $\alpha_{30},\ \alpha'_{31},\ \alpha'_{33}$. Część rotacyjna opisana jest przez moment pędu mający największy wkład w kierunku osi OX i OZ. Opisane wyniki zostały przedstawione w tabeli 18.

stan	schemat	wzbudzenie dla funkcji początkowej		główne osie rozkładu prawd. momentu pędu
		kwadrupolowej	oktupolowej	
2^-	i	-	α_{30}	OX, OZ
	ii, iii	-	α'_{31}	OX, OZ
4^-	i	-	α_{30}	OX, OZ
	ii, iii	-	α'_{31}	OX, OZ

Tablica 18: Opis funkcji bazowych dla schematu 3., pasmo 3, cz.2
opis funkcji bazowych dających największe prawdopodobieństwo wkładu do stanów z trzeciego pasma schematu 3, cz.2.

(c) Wyniki dla oktupolowego pasma o parzystym momencie pędu opisane przez stany:

$$
\begin{aligned}
4^- &: \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E}R_E^{JM}, \\
2^- &: \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(-);E}R_E^{JM}.
\end{aligned}
\tag{446}
$$

Dla powyższego wyboru pasma trzeciego opis stanów jest analogiczny jak dla przypadku (445). Wyniki otrzymane dla tego pasma przedstawione są w tabeli 19.

stan	schemat	wzbudzenie dla funkcji początkowej		główne osie rozkładu prawd. momentu pędu
		kwadrupolowej	oktupolowej	
2^-	i	-	α_{30}	OX, OZ
	ii, iii	-	α'_{31}	OX, OZ
4^-	i	-	α_{30}	OX, OZ
	ii, iii	-	α'_{31}	OX, OZ

Tablica 19: Opis funkcji bazowych dla schematu 3., pasmo 3, cz.3
opis funkcji bazowych dających największe prawdopodobieństwo wkładu do stanów z trzeciego pasma schematu 3, cz.3

(d) Wyniki dla oktupolowego pasma o parzystym momencie pędu opisane są przez stany:

$$4^- : \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E}R_E^{JM},$$
$$2^- : \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E}R_E^{JM}. \quad (447)$$

W tym przypadku dla schematów ii oraz iii część wibracyjna głównie pochodzi ze wzbudzenia funkcji początkowej w zmiennej α_{30}, a dla modelu i przy α'_{33}. Zatem wzbudzenie pojawiające się w funkcji bazowej znajduje się przy zmiennych α_{30}, α'_{31}, α'_{32}, oraz dla drugiego przypadku przy $\alpha_{30}, \alpha'_{32}, \alpha'_{33}$. Część rotacyjna opisana jest przez moment pędu skierowany w kierunku osi OX, OZ oraz dodatkowo w kierunku osi obróconych względem układu współrzędnych dla stanu 4^-.

Wybór trzeciego pasma opisanego przez (447) powoduje, że dla stanu 4^- wartości prawdopodobieństwa otrzymane dla funkcji bazowych są identyczne jak dla funkcji posiadających taką samą część wibracyjną, a różniące się jedynie częścią rotacyjną, która może należeć do jednej z dwóch równoważnych reprezentacji dwuwymiarowych $E_{;1}$ lub $E_{;2}$. Przedstawione schematy opisane są w tabeli 20.

6.5.2 Czy pasmo oktupolowe o parzystym momencie pędu ma inną strukturę niż pasmo oktupolowe o nieparzystych momentach pędu?

W tym modelu oprócz wprowadzenia parametrów opisujących dwa pierwsze pasma analizujemy zbiór parametrów opisujących trzecie pasmo - traktujemy te parametry jako swobodne. Ponadto wybieramy tylko te schematy, które mają również odpowiednią wartość dla η_2 i η_3, wynikającą z mikroskopowych rachunków [80].

stan	schemat	wzbudzenie dla funkcji początkowej		główne osie rozkładu prawd. momentu pędu
		kwadrupolowej	oktupolowej	
2^-	i	-	α'_{33}	OX, OZ
	ii, iii	-	α_{30}	OX, OZ
4^-	i	-	α'_{33}	OX, OZ, skośne
	ii, iii	-	α_{30}	OX, OZ, skośne

Tablica 20: Opis funkcji bazowych dla schematu 3., pasmo 3, cz.4
opis funkcji bazowych dających największe prawdopodobieństwo wkładu do stanów z trzeciego pasma schematu 3, cz.4.

Wśród wszystkich szesnastu schematach jedynie jeden spełnia powyższe wymagania. Dla tego schematu stany dwóch pierwszych pasm są opisane przez następujące funkcje:

$$\begin{aligned} &4^+: \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3} R^{JM}_{A_1}, \qquad 5^-: \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_{E}, \\ &2^+: \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3} R^{JM}_{B_1}, \qquad 3^-: \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_{E}. \\ &0^+: \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3} R^{JM}_{A_1}, \end{aligned} \tag{448}$$

Dla podanej powyżej struktury stanów zostały otrzymane trzy możliwe zbiory parametrów, dla których uzyskano dość dobrą zgodność z wartościami eksperymentalnymi, również dla przejść międzypasmowych $B(E1)$. Wartości otrzymanych parametrów oraz uzyskanych dla nich przejść wewnętrz i międzypasmowych są następujące:

(i) $\eta_2 = 10{,}641$, $\eta_3 = 13{,}103$ oraz

$$\mathring{\alpha}_{30} = 0{,}111, \quad \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}099, \quad \mathring{\alpha}'_{32} = 0{,}108, \quad \mathring{\alpha}'_{33} = 0{,}110. \tag{449}$$

Korzystając z tych parametrów otrzymujemy następujące wartości przejść $B(E2)$ i $B(E1)$:

$$\begin{aligned} &B(E2\colon 4^+ \to 2^+) = 263\ W.u, \quad B(E1\colon 5^- \to 4^+) = 0{,}146 \times 10^{-3}\ W.u, \\ &B(E2\colon 2^+ \to 0^+) = 187\ W.u, \quad B(E1\colon 3^- \to 4^+) = 0{,}212 \times 10^{-3}\ W.u, \\ &B(E2\colon 5^- \to 3^-) = 293\ W.u, \quad B(E1\colon 3^- \to 2^+) = 0{,}262 \times 10^{-4}\ W.u. \end{aligned} \tag{450}$$

(ii) $\eta_2 = 9{,}902$, $\eta_3 = 13{,}792$,

$$\mathring{\alpha}_{30} = 0{,}106, \quad \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}099, \quad \mathring{\alpha}'_{32} = 0{,}090, \quad \mathring{\alpha}'_{33} = 0{,}123, \tag{451}$$

dla których mamy:

$$B(E2\colon 4^+ \to 2^+) = 263\ W.u, \quad B(E1\colon 5^- \to 4^+) = 0{,}168 \times 10^{-3}\ W.u,$$
$$B(E2\colon 2^+ \to 0^+) = 187\ W.u, \quad B(E1\colon 3^- \to 4^+) = 0{,}103 \times 10^{-3}\ W.u,$$
$$B(E2\colon 5^- \to 3^-) = 293\ W.u, \quad B(E1\colon 3^- \to 2^+) = 0{,}165 \times 10^{-3}\ W.u. \tag{452}$$

(iii) $\eta_2 = 10{,}655$, $\eta_3 = 6{,}932$,

$$\mathring{\alpha}_{30} = -0{,}034, \quad \mathring{\alpha}'_{31} = -0{,}068, \quad \mathring{\alpha}'_{32} = -0{,}415, \quad \mathring{\alpha}'_{33} = -0{,}080, \tag{453}$$

dla których otrzymujemy:

$$B(E2\colon 4^+ \to 2^+) = 263\ W.u, \quad B(E1\colon 5^- \to 4^+) = 0{,}326 \times 10^{-3}\ W.u,$$
$$B(E2\colon 2^+ \to 0^+) = 187\ W.u, \quad B(E1\colon 3^- \to 4^+) = 0{,}380 \times 10^{-3}\ W.u,$$
$$B(E2\colon 5^- \to 3^-) = 293\ W.u, \quad B(E1\colon 3^- \to 2^+) = 0{,}666 \times 10^{-3}\ W.u. \tag{454}$$

W pierwszych dwóch zbiorach parametrów (449) i (451) oktupolowe deformacje statyczne przyjmują wartości bliskie 0,1 co odpowiada wynikom otrzymanych w [80]. W przypadku trzeciego zbioru parametrów (453) bezwzględna wartość $\mathring{\alpha}'_{32}$ wynosi 0,4, jest więc za duża biorąc pod uwagę mapy potencjałów [80].

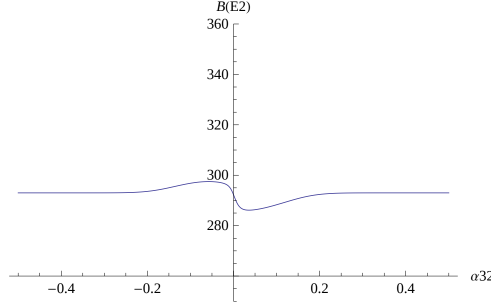
W celu sprawdzenia jak mogą się zmienić przejścia $B(E2)$ i $B(E1)$ w ostatnim przypadku dla dwóch pierwszych pasm zostały narysowane wykresy zależności zredukowanych prawdopodobieństw przejść w zależności od $\mathring{\alpha}'_{32}$ w przedziale $[-0{,}5; 0{,}5]$. W paśmie kwadrupolowym, ze względu na brak deformacji oktupolowych dla $B(E2)$ nie ma zależności od parametru $\mathring{\alpha}'_{32}$. Otrzymane wykresy dla pozostałych $B(E2)$ i $B(E1)$ przedstawione są poniżej:

(a) zredukowane prawdopodobieństwo przejścia $B(E2\colon 5^- \to 3^-)$ przedstawione jest na rysunku 16,

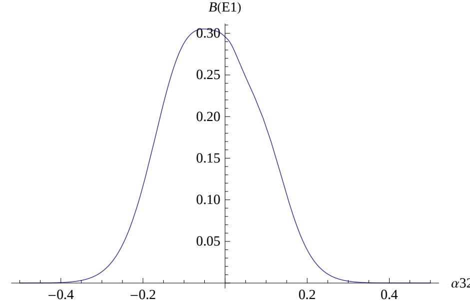
(b) wykres zależności $B(E1\colon 5^- \to 4^+)$ od deformacji statycznej $\mathring{\alpha}'_{32}$ przedstawia rysunek 17,

(c) wykres wartości $B(E1\colon 3^- \to 4^+)$ w zależności od wartości $\mathring{\alpha}'_{32}$ przedstawiony jest na rysunku 18,

(d) wykres $B(E1\colon 3^- \to 2^+)$ w zależności od wartości $\mathring{\alpha}'_{32}$ przedstawiony jest na rysunku 19.



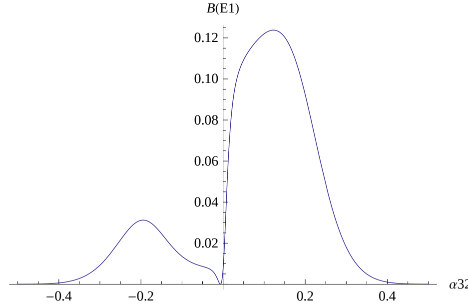
Rysunek 16: Wykres $B(E2\colon 5^- \to 3^-)$ w zależności od tetraedralnej deformacji statycznej $\alpha 32 \equiv \mathring{\alpha}'_{32}$.



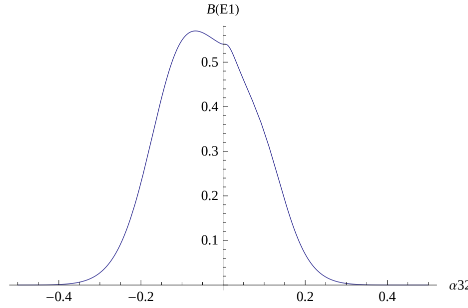
Rysunek 17: Wykres $B(E1\colon 5^- \to 4^+)$ w zależności od tetraedralnej deformacji statycznej $\alpha 32 \equiv \mathring{\alpha}'_{32}$.

Otrzymane wykresy nie są symetryczne względem osi rzędnych co mógłby sugerować potencjał dla części oktupolowej, który posiada dwa minima symetrycznie rozłożone dla każdej ze zmiennych $\alpha_{30},\ \alpha'_{3\mu},\ \mu = 1, 2, 3$. Oznacza to, że minima dla każdego z kierunków zmiennych oktupolowych pojawiają się odpowiednio dla deformacji statycznych $\pm\mathring{\alpha}_{30}$ lub $\pm\mathring{\alpha}'_{3\mu},\ \mu = 1, 2, 3$. Zatem również funkcje nie powinny być czułe na zamianę znaku przy deformacjach statycznych. Niestety takie rozumowanie nie jest prawdziwe dla deformacji rozpatrywanych tylko w jednym kierunku. Zmiana znaku przy statycznych deformacjach oktupolowych w funkcjach bazowych zsymetryzowanych względem grupy symetryzacji $\overline{D}_{4;y}$ nie zmienia jej wartości, gdy jednocześnie następuje ona przy $\pm\mathring{\alpha}_{30}$ i $\pm\mathring{\alpha}'_{32}$ oraz dla pary $\pm\mathring{\alpha}'_{31}$ i $\pm\mathring{\alpha}'_{33}$. Oprócz podanych dwóch par deformacji, funkcja ma tę samą wartość, gdy jednocześnie zmiana znaku następuje dla wszystkich deformacji oktupolowych. Więc zmiana znaku jedynie przy $\mathring{\alpha}'_{32}$ nie oznacza, że funkcja bazowa będzie miała tę samą wartość. Stąd wynika, że przedstawione powyższe wykresy nie posiadają symetrii względem osi rzędnych.

Celem analizy otrzymywanych wartości zredukowanych prawdopodobieństw



Rysunek 18: Wykres $B(E1\colon 3^- \to 4^+)$ w zależności od tetraedralnej deformacji statycznej $\alpha 32 \equiv \mathring{\alpha}'_{32}$.



Rysunek 19: Wykres $B(E1\colon 3^- \to 2^+)$ w zależności od tetraedralnej deformacji statycznej $\alpha 32 \equiv \mathring{\alpha}'_{32}$.

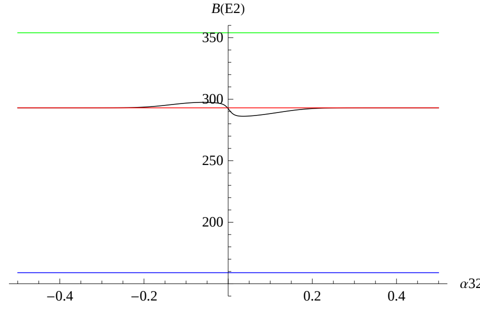
prześć $B(E2)$ i $B(E1)$ w zależności od $\mathring{\alpha}'_{32}$ było sprawdzenie czy istnieją dodatkowo inne wartości teraedralnej deformacji statycznej, dla której otrzymuje się wartości eksperymentalne. Pojawienie się takich wartości oznaczałoby istnienie wielu punktów dających ten sam wynik, które z tego powodu zostały pominięte podczas procedury minimalizacji. Na powyższe wykresy zostały nałożone trzy proste określające podaną wartość eksperymentalną oraz górną i dolną jej granicę. Kolorem zielonym została oznaczona górna granica przedziału niepewności pomiarowej, niebieskim - dolna granica, a czerwonym wartość eksperymentalna [5, 6]:

(a) wykres dla $B(E2\colon 5^- \to 3^-)$ przedstawiony jest na rysunku 20.

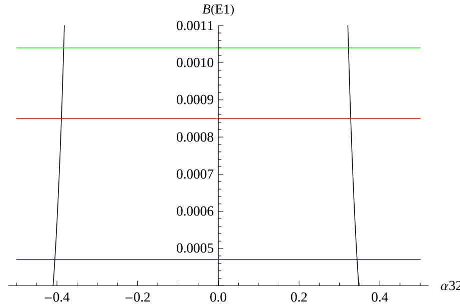
(b) wykres dla $B(E1\colon 5^- \to 4^+)$ przedstawia rysunek 21.

(c) rysunek 22 przedstawia podane zależności dla $B(E1\colon 3^- \to 4^+)$.

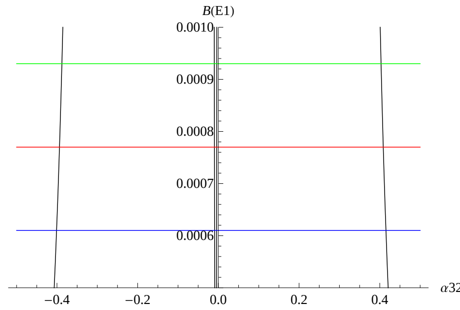
(d) dla $B(E1\colon 3^- \to 2^+)$ wykres przedstawiony jest na rysunku 23.



Rysunek 20: Wykres $B(E2\colon 5^- \to 3^-)$ w zależności od $\alpha 32 \equiv \mathring{\alpha}'_{32}$ z wartościami eksperymentalnymi.

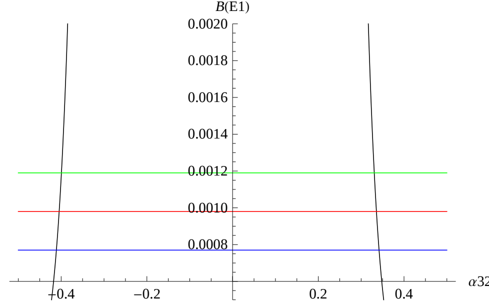


Rysunek 21: Wykres $B(E1\colon 5^- \to 4^+)$ w zależności od $\alpha 32 \equiv \mathring{\alpha}'_{32}$ z wartościami eksperymentalnymi.



Rysunek 22: Wykres $B(E1\colon 3^- \to 4^+)$ w zależności od $\alpha 32 \equiv \mathring{\alpha}'_{32}$ z wartościami eksperymentalnymi.

W przypadku $B(E1)$ otrzymujemy dwie możliwości, które leżą w pobliżu wartości eksperymentalnej: pierwsza znajduje się w pobliżu $-0{,}4$, co zostało uzyskane podczas minimalizacji oraz druga w 0,4. Dla $B(E2)$ otrzymuje się dokładnie wartość eksperymentalną w obu przypadkach. Można zatem sprawdzić jakie wartości będą miały przejścia $B(E1)$ i $B(E2)$ dla drugiej wartości



Rysunek 23: Wykres $B(E1\colon 3^- \to 2^+)$ w zależności od $\alpha 32 \equiv \mathring{\alpha}'_{32}$ z wartościami eksperymentalnymi.

$\mathring{\alpha}'_{32}$ znajdującej się w przedziale od 0,3 do 0,5. W tym celu zostało zrobione dopasowanie dodanych eksperymentalnych przejść $B(E2)$ dla dwóch pierwszych pasm znajdujące najlepiej pasującą wartość $\mathring{\alpha}'_{32}$ w podanym przedziale, gdzie pozostałe parametry są niezmienione. Z obliczeń wynosi ona $\mathring{\alpha}'_{32} = 0{,}385$, a wartości $B(E1)$ otrzymane dla niej są następujące:

(a) $B(E2\colon 5^- \to 3^-) = 293\ W.u,$

(b) $B(E1\colon 5^- \to 4^+) = 8{,}767 \times 10^{-5}\ W.u,$

(c) $B(E1\colon 3^- \to 4^+) = 1{,}710 \times 10^{-3}\ W.u,$

(d) $B(E1\colon 3^- \to 2^+) = 1{,}257 \times 10^{-4}\ W.u.$

Wartości te gorzej odtwarzają wyniki eksperymentalne niż dla $\mathring{\alpha}'_{32} = -0{,}4$. Zatem, dla omawianego modelu, faktycznie wartość bezwzględna deformacji oktupolowej w kierunku zmiennej α'_{32} jest duża w porównaniu z wynikami jakie otrzymywane są w rachunkach mikroskopowych [80].

Zgodnie z tym co zostało przedstawione wcześniej w omawianym modelu zmiany dotyczą konstrukcji trzeciego pasma. Wynika to z przyjęcia hipotezy, że minimum dla tego pasma, opisane przez deformacje statyczne może leżeć gdzie indziej niż w przypadku dwóch pierwszych pasm. Oznacza to znalezienie postaci stanów, gdy zmiennymi są również parametry deformacji kwadrupolowych i oktupolowych oraz $\eta_2,\ \eta_3$. Dla trzeciego pasma parametry te były rozważane dla następujących przedziałów: oktupolowe deformacje statyczne od $-0{,}15$ do $0{,}15$, dodatkowo obliczone zostały deformacje kwadrupolowe $\alpha_{20},\ \alpha_{22}$ w przedziale $-0{,}90$ do $0{,}90$ oraz $\eta_2,\ \eta_3$ od 0,01 do 20. Gdzie minimalizacja dla $\eta_2,\ \eta_3$ przebiegała w przedziałach $[0{,}01; 5]$, $[5; 10]$, $[10; 15]$, $[15; 20]$. Łącznie zostały otrzymane cztery możliwe kombinacje funkcji bazowych reprezentacji nieprzywiedlnych $\overline{D}_{4;y}$. Są to stany postaci:

(a) dla pierwszej możliwości mamy:

$$4^-: \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(-);E} R_E^{JM},$$
$$2^-: \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(-);E} R_E^{JM}, \tag{455}$$

(b) drugi opis oktupolowego pasma o parzystym momencie pędu zawiera stany:

$$4^-: \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(-);E} R_E^{JM},$$
$$2^-: \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E} R_E^{JM}, \tag{456}$$

(c) następna możliwość opisu pasma ma postać:

$$4^-: \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E} R_E^{JM},$$
$$2^-: \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(-);E} R_E^{JM}, \tag{457}$$

(d) stany opisujące trzecie pasmo mogą mieć postać:

$$4^-: \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E} R_E^{JM},$$
$$2^-: \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E} R_E^{JM}. \tag{458}$$

Zostało otrzymanych siedem możliwych schematów odtwarzających dane eksperymentalne dla ^{156}Gd. Ponieważ parametry dla poszczególnych stanów były otrzymane metodą najmniejszych kwadratów dla różnicy przejść $B(E2)$ i wartości eksperymentalnych, otrzymane funkcje odtwarzają dokładnie wartości tych przejść. Dodatkowym kryterium było również jak najlepsze odtworzenie przejść międzypasmowych. Wśród otrzymanych schematów, które najlepiej odtwarzały wartości $B(E2)$ i $B(E1)$ przedstawione w [5] i [6], została określona kolejność, która odzwierciedla otrzymaną zgodność z danymi eksperymentalnymi. W tym celu została wykorzystana metoda najmniejszych kwadratów dla różnicy przejść $B(E1)$ otrzymanych w wybranych modelach i wartości eksperymentalnych. Ponieważ eksperymentalna wartość $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ posiada jedynie ograniczenie górne przy tych obliczeniach to przejście było pomijane.

Poniżej przedstawione są schematy w kolejności od najlepiej odtwarzającego przejścia otrzymanego w eksperymencie [5] i [6].

Wszystkie rozpatrywane schematy mają taką samą budowę dwóch pierwszych pasm, tj.:

$$4^+: \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(+);A_1} R_{A_1}^{JM}, \qquad 5^-: \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E} R_E^{JM},$$
$$2^+: \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(+);A_1} R_{B_1}^{JM}, \qquad 3^-: \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(-);E} R_E^{JM}.$$
$$0^+: \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(+);A_1} R_{A_1}^{JM}, \tag{459}$$

Różnią się one jedynie parametrami opisującymi stany oraz budową trzeciego pasma:

(I) Pierwsze dwa schematy mają następujące parametry opisujące stany dla dwóch pierwszych pasm:

$$\eta_2 = 10{,}655, \quad \eta_3 = 6{,}932, \\ \mathring{\alpha}_{20} = 0{,}34, \quad \mathring{\alpha}_{22} = 10^{-5}, \tag{460}$$

$$\mathring{\alpha}_{30} = -0{,}034, \;\; \mathring{\alpha}'_{31} = -0{,}068, \;\; \mathring{\alpha}'_{32} = -0{,}415, \;\; \mathring{\alpha}'_{33} = -0{,}080, \tag{461}$$

oraz parametry dla stanów występujących w trzecim paśmie:

$$\eta_2 = 7{,}648, \quad \eta_3 = 7{,}273, \\ \mathring{\alpha}_{20} = -0{,}332, \quad \mathring{\alpha}_{22} = 0{,}580, \tag{462}$$

$$\mathring{\alpha}_{30} = 0{,}041, \;\; \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}024, \;\; \mathring{\alpha}'_{32} = -0{,}018, \;\; \mathring{\alpha}'_{33} = -0{,}073, \tag{463}$$

(1) Schemat 1. posiada następującą postać trzeciego pasma:

$$4^-: \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \\ 2^-: \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \tag{464}$$

gdzie wartości przejść mieszczą się w przedziałach niepewności pomiarowej wyznaczonych w eksperymencie:

$$B(E2\colon 4^- \to 2^-) = 724\ W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) = 0{,}103 \times 10^{-3}\ W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) = 1{,}359 \times 10^{-7}\ W.u, \tag{465}$$

(2) W schemacie 2. trzecie pasmo opisane jest przez stany:

$$4^-: \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \\ 2^-: \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \tag{466}$$

dla którego $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ ma wartość bliską granicy górnej przedziału niepewności pomiarowej, ale nie mieści się w samym przedziale oraz $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ jest o jeden rząd większa od granicznej wartości wynikającej z eksperymentu:

$$B(E2\colon 4^- \to 2^-) = 724\ W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) = 0{,}505 \times 10^{-3}\ W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) = 0{,}596 \times 10^{-3}\ W.u. \tag{467}$$

(II) Kolejne dwa schematy mają następujące parametry opisujące stany dla dwóch pierwszych pasm:

$$\begin{aligned} \eta_2 &= 9{,}902, \quad \eta_3 = 13{,}792, \\ \mathring{\alpha}_{20} &= 0{,}34, \quad \mathring{\alpha}_{22} = 10^{-5}, \end{aligned} \tag{468}$$

$$\mathring{\alpha}_{30} = 0{,}106, \quad \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}099, \quad \mathring{\alpha}'_{32} = 0{,}090, \quad \mathring{\alpha}'_{33} = 0{,}123, \tag{469}$$

oraz parametry dla trzeciego pasma:

$$\begin{aligned} \eta_2 &= 7{,}648, \qquad \eta_3 = 7{,}273, \\ \mathring{\alpha}_{20} &= -0{,}332, \quad \mathring{\alpha}_{22} = 0{,}580, \end{aligned} \tag{470}$$

$$\mathring{\alpha}_{30} = 0{,}041, \quad \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}024, \quad \mathring{\alpha}'_{32} = -0{,}018, \quad \mathring{\alpha}'_{33} = -0{,}073, \tag{471}$$

(3) Schemat 3. posiada następującą postać trzeciego pasma:

$$\begin{aligned} 4^- &: \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \\ 2^- &: \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \end{aligned} \tag{472}$$

gdzie $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ mieści się w przedziale wyznaczonym z eksperymentu, a $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ jest trzy rzędy za małe:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 724\ W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}000054\ W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 1{,}565 \times 10^{-7}\ W.u, \end{aligned} \tag{473}$$

(4) W schemacie 4. trzecie pasmo opisane jest przez stany:

$$\begin{aligned} 4^- &: \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \\ 2^- &: \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \end{aligned} \tag{474}$$

gdzie $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ ma wartość bliską górnej granicy przedziału niepewności eksperymentalnej, a $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ jest o jeden rząd za duże:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 724\ W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}384 \times 10^{-3}\ W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}675 \times 10^{-3}\ W.u. \end{aligned} \tag{475}$$

(III) Ostatnie trzy schematy mają następujące parametry opisujące stany dla dwóch pierwszych pasm:

$$\eta_2 = 10{,}641, \quad \eta_3 = 13{,}103, \\ \mathring{\alpha}_{20} = 0{,}34, \quad \mathring{\alpha}_{22} = 10^{-5}, \tag{476}$$

$$\mathring{\alpha}_{30} = 0{,}111, \;\; \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}099, \;\; \mathring{\alpha}'_{32} = 0{,}108, \;\; \mathring{\alpha}'_{33} = 0{,}110, \tag{477}$$

(5) Schemat 5. posiada podaną poniżej postać trzeciego pasma:

$$4^- : \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \\ 2^- : \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \tag{478}$$

gdzie

$$\eta_2 = 7{,}648, \qquad \eta_3 = 7{,}273, \\ \mathring{\alpha}_{20} = -0{,}332, \quad \mathring{\alpha}_{22} = 0{,}580, \tag{479}$$

$$\mathring{\alpha}_{30} = 0{,}041, \;\; \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}024, \;\; \mathring{\alpha}'_{32} = -0{,}018, \;\; \mathring{\alpha}'_{33} = -0{,}073. \tag{480}$$

Wartości przejść między i wewnątrzpasmowych otrzymanych dla podanych parametrów są następujące:

$$B(E2\colon 4^- \to 2^-) = 724\ W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) = 0{,}111 \times 10^{-3}\ W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) = 0{,}457 \times 10^{-3}\ W.u, \tag{481}$$

gdzie $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ odtwarza wartość eksperymentalną, a $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ jest o rząd większe od granicy górnej.

(6) Schemat 6. posiada następującą postać trzeciego pasma:

$$4^- : \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \\ 2^- : \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \tag{482}$$

gdzie

$$\eta_2 = 7{,}648, \qquad \eta_3 = 7{,}273, \\ \mathring{\alpha}_{20} = -0{,}332, \quad \mathring{\alpha}_{22} = 0{,}580, \tag{483}$$

$$\mathring{\alpha}_{30} = 0{,}041, \quad \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}024, \quad \mathring{\alpha}'_{32} = -0{,}018, \quad \mathring{\alpha}'_{33} = -0{,}073, \tag{484}$$

a

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 724\ W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 7{,}200 \times 10^{-6}\ W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 1{,}030 \times 10^{-7}\ W.u, \end{aligned} \tag{485}$$

gdzie $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ mieści się w przedziale niepewności, natomiast wartość $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ jest prawie o trzy rzędy za mała.

(7) W schemacie 7. postać trzeciego pasma jest następująca:

$$\begin{aligned} 4^-\colon & \psi_{vib2}^{B_1} \psi_{vib3}^{(-);E} R_E^{JM}, \\ 2^-\colon & \psi_{vib2}^{A_1} \psi_{vib3}^{(-);E} R_E^{JM}, \end{aligned} \tag{486}$$

gdzie

$$\begin{aligned} \eta_2 &= 8{,}311, & \eta_3 &= 11{,}421, \\ \mathring{\alpha}_{20} &= -0{,}312, & \mathring{\alpha}_{22} &= 0{,}604, \end{aligned} \tag{487}$$

$$\mathring{\alpha}_{30} = -0{,}001, \quad \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}043, \quad \mathring{\alpha}'_{32} = -0{,}064, \quad \mathring{\alpha}'_{33} = -0{,}129. \tag{488}$$

Odpowiadające zredukowane prawdopodobieństwa wynoszą:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 724\ W.u, \\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 1{,}144 \times 10^{-6}\ W.u, \\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 6{,}968 \times 10^{-7}\ W.u, \end{aligned} \tag{489}$$

gdzie podobnie jak w schemacie 6: $B(E1\colon 2^- \to 2^+)$ mieści się w przedziale niepewności, a $B(E1\colon 4^- \to 4^+)$ jest o trzy rzędy za małe.

Analiza otrzymanych wyników dla modelu o rzeczywistych zmiennych, w którym parametry opisujące oktupolowe pasmo o parzystych momentach pędu mają inne wartości niż użyte do opisu oktupolowego pasma o nieparzystym momencie pędu. Z rozkładu prawdopodobieństwa występowanie poszczególnych funkcji bazowych w stanach (dodatek E) oraz orientacji momentu pędu (podrozdział 6.2.5) mamy następujące charakterystyki dla przedstawionego modelu:

(a) Stan 0^+:
zbudowany jest tylko z jednego iloczynu trzech funkcji bazowych, które należą do reprezentacji A_1 grupy $\overline{D}_{4;y}$. Część kwadrupolowa pochodzi z funkcji $u_0(\eta_2; \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20})\ u_0(\sqrt{2}\eta_2; \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22})$ natomiast oktupolowa z:

$$u_0(\eta_3; \alpha_{30}) u_0(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{31}) u_0(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{32}) u_0(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{33}). \tag{490}$$

Dla tego stanu rozkład prawdopodobieństwa momentu pędu jest taki sam w każdym kierunku.

(b) Stan 2^+:
dominujący wkład ma funkcja nie posiadająca wzbudzenia zarówno w części kwadrupolowej, pochodzącej z rzutu funkcji początkowej $u_0(\eta_2; \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20})\ u_0(\sqrt{2}\eta_2; \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22})$ na reprezentację B_1, jak i oktupolowej, która jest funkcją symetryczną względem obrotów:

$$u_0(\eta_3; \alpha_{30}) u_0(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{31}) u_0(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{32}) u_0(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{33}). \tag{491}$$

Główną osią rozkładu prawdopodobieństwa momentu pędu dla tego stanu jest kierunek równoległy do osi OY.

(c) Stan 4^+:
analogicznie jak dla stanu 2^+, również tutaj największy wkład do pełnej funkcji ma funkcja nieposiadająca wzbudzeń. Dodatkowo dla tych funkcji część rotacyjna należy do jednej z dwóch równoważnych reprezentacji A_1 oznaczonej jako $A_{1;1}$. Rozkład prawdopodobieństwa momentu pędu jest głównie rozłożony w kierunku osi OY.

(d) Stan 3^-:

(d1) Dla schematów 1, 2, 3 i 4 największy wkład w stan 3^- ma funkcja oznaczona jako $A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$, tj. dla której część oktupolowa powstała z rzutowania $u_0(\eta_3; \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}) u_1(\sqrt{2}\eta_2; \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31})$ $\times u_0(\sqrt{2}\eta_2; \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}) u_0(\sqrt{2}\eta_2; \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33})$ na reprezentację dwuwymiarową E. Daje to wzbudzenie występujące przy zmiennych $\alpha'_{31},\ \alpha_{30}$ oraz α'_{32}. Główną osią rozkładu prawdopodobieństwa momentu pędu dla tego stanu jest kierunek równoległy do osi OY.

(d2) Dla schematu 5, 6 i 7 największy wkład posiadają funkcje oznaczone jako $A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$, $A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$ oraz $A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$. Co oznacza, że każda z funkcji w części oktupolowej powstała odpowiednio z funkcji początkowej mającej wzbudzenie stojące przy zmiennych $\alpha'_{31},\ \alpha_{30}$ oraz α'_{32}. Dwie funkcje

mają tę samą część rotacyjną opisaną przez jedną z dwóch równoważnych reprezentacji dwuwymiarowych E oznaczonej jako $E_{;1}$, co daje największy rozkład w kierunku OY, druga opisana jest przez reprezentację $E_{;2}$ mającej największy rozkład w kierunku OX i OZ.

(e) Stan 5^-:

(e1) dla schematów 1 i 2 największy wkład posiada funkcja oznaczona jako $B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$, gdzie część oktupolowa pochodzi z funkcji początkowej mającej wzbudzenie w zmiennych α'_{31}. Największy wkład do rozkładu prawdopodobieństwa momentu pędu jest w kierunku OY.

(e2) dla schematów 3 i 4 największy wkład posiada funkcja oznaczona jako $B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$, gdzie część oktupolowa pochodzi z funkcji początkowej mającej wzbudzenie w zmiennych α_{30}. Największy wkład do rozkładu prawdopodobieństwa momentu pędu jest w kierunku OY.

(e3) Dla schematu 5, 6 i 7 największy wkład posiada funkcja oznaczone jako $B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$, gdzie część oktupolowa pochodzi z funkcji początkowej, dla której wzbudzenie pojawia się w części zależnej od α_{30}. Największy wkład do rozkładu prawdopodobieństwa momentu pędu jest w kierunku osi obróconych względem układu współrzędnych.

(f) Stan 2^-:
Dla reprezentacji $\Gamma_1 = A_1$ opisującej część kwadrupolową mamy:

(f1) dla schematów 2, 4 i 5 największy wkład posiada funkcja $A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E$, gdzie część oktupolowa pochodzi z funkcji początkowej mającej wzbudzenie w zmiennych α'_{31}. Największy wkład do rozkładu prawdopodobieństwa momentu pędu jest w kierunku OX i OZ.

(f2) Dla schematu 7. największy wkład posiada funkcja oznaczona jako $B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$, gdzie część oktupolowa pochodzi z funkcji początkowej wzbudzonej w kierunku α_{30}. Największy wkład do rozkładu prawdopodobieństwa momentu pędu jest w kierunku OX i OZ.

Dla reprezentacji $\Gamma_1 = B_1$ opisującej cześć kwadrupolową mamy schematy 1,3 i 6, dla których największy wkład posiada funkcja

$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E$, gdzie część oktupolowa pochodzi z funkcji początkowej mającej wzbudzenie w zmiennej α'_{31}. Największy wkład do rozkładu prawdopodobieństwa momentu pędu jest w kierunku OX i OZ.

(g) Stan 4^-:
Dla reprezentacji $\Gamma_1 = A_1$ opisującej cześć kwadrupolową mamy schematy 1, 3 i 6 do których największy wkład wnosi funkcja $A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$ oraz $A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$ i $A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$. Zatem części oktupolowe pochodzą odpowiednio z funkcji początkowych mających wzbudzenie w kierunku α'_{32}, α_{30}. Największy wkład do rozkładu prawdopodobieństwa momentu pędu jest w kierunku OX i OZ oraz osi obróconych względem układu współrzędnych.

Gdy $\Gamma_1 = B_1$ wówczas mamy:

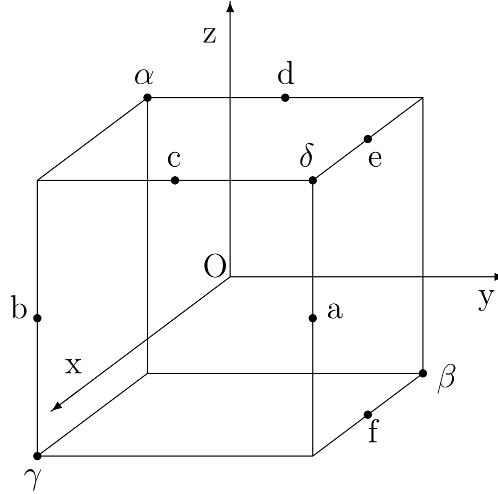
(g1) dla schematów 2, 4 i 5 największy wkład posiadające te same funkcje jak dla schematów 1, 3 i 6, różniące się jedynie reprezentacją części kwadrupolowej, którą obecnie jest B_1. Rozkład prawdopodobieństwa momentu pędu jest identyczny jak przedstawiony dla wcześniejszych schematów.

(g2) Dla schematu 7. największy wkład posiada funkcja oznaczona jako $B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$, gdzie część oktupolowa pochodzi z funkcji początkowej wzbudzonej w kierunku α'_{33}. Największy wkład do rozkładu prawdopodobieństwa momentu pędu jest w kierunku osi obróconych względem układu współrzędnych.

Z przedstawionego powyżej opisu wynika, że rozkład prawdopodobieństw momentu pędu, dla funkcji mających największy wkład w stany należące do dwóch pierwszych pasm, jest głównie rozłożony wzdłuż osi OY. W przypadku trzeciego pasma otrzymane kształty są bardziej skomplikowane. Na ogół najbardziej są rozciągnięte w kierunkach osi OX i OZ. Różnice te mogą tłumaczyć dlaczego trudno było otrzymać postać trzeciego pasma mającego te same parametry deformacji kwadrupolowej i oktupolowej jak dla dwóch pierwszych pasm. Dopiero zmiana położenia minimów, zarówno w części kwadrupolowej i oktupolowej, dała możliwość odtworzenia wyników eksperymentalnych, [5, 6]. Oznacza to nieco inną strukturę trzeciego pasma.

A Grupy punktowe

Korzystając z [2] obroty należące do grup punktowych można opisać względem następujących osi $Ox, Oy, Oz, Oa, Ob, Oc, Od, Oe, Of, O\alpha, O\beta, O\gamma, O\delta$ przedstawionych na rysunku 24.



Rysunek 24: Osie obrotu dla grup punktowych.

Do oznaczeń elementów grup punktowych użyte są symbole Schönfliesa określające kąt oraz oś obrotu:
E - element jednostowy,
C_{nw} - obrót wokół osi w o kąt $\frac{2\pi}{n}$,
C_{nw}^{-1} - obrót wokół osi w o kąt $-\frac{2\pi}{n}$,
I - inwersja przestrzenna.

A.1 Grupa O

Grupa oktahedralna O opisująca symetrię sześcianu składa się z 24 obrotów właściwych, które zgodnie z [2] mają postać:

$$E, C_{3\alpha}, C_{3\beta}, C_{3\gamma}, C_{3\delta}, C_{3\alpha}^{-1}, C_{3\beta}^{-1}, C_{3\gamma}^{-1}, C_{3\delta}^{-1}, C_{2x}, C_{2y}, C_{2z},$$
$$C_{4x}, C_{4y}, C_{4z}, C_{4x}^{-1}, C_{4y}^{-1}, C_{4z}^{-1}, C_{2a}, C_{2b}, C_{2c}, C_{2d}, C_{2e}, C_{2f}. \tag{492}$$

Grupę O można rozłożyć na pięć nieprzywiedlnych reprezentacji: dwie jednowymiarowe A_1 i A_2, jedną dwuwymiarową E oraz dwie trójwymiarowe T_1 i T_2.

Każda z nieprzywiedlnych reprezentacji działa w podprzestrzeni niezmienniczej rozpiętej przez określoną bazę. Znając działanie elementów grupy w danej przestrzeni można otrzymać macierze reprezentacji odpowiadające transformacjom wybranych wektorów bazowych. Dla macierzy przedstawionych w [2] można skonstruować następujące wektory bazowe jako funkcje zmiennych kartezjańskich [9, 10, 11][9]:

(i) dla reprezentacji symetrycznej A_1 funkcją bazową jest funkcja skalarna, którą można przedstawić np. jako $x^2 + y^2 + z^2$,

(ii) dla reprezentacji A_2 funkcja bazowa przyjmuje postać: xyz,

(iii) dla reprezentacji E mamy dwie funkcje bazowe: $\sqrt{3}(x^2 - y^2)$ oraz $2z^2 - x^2 - y^2$,

(iv) dla reprezentacji T_1 funkcje bazowe mogą mieć postać jednomianów: x, y, z,

(v) dla reprezentacji T_2 funkcjami bazowymi są: yz, xz, xy.

Znając macierze reprezentacji Γ można otrzymać dla każdego elementu g grupy G charaktery $\chi(g)$, które są śladami macierzy reprezentacji $\Delta^{\Gamma}(g)$ elementu g, tj. $\chi(g) = Tr(\Delta^{\Gamma}(g))$. W przedstawionej pracy wartości charakterów wykorzystywane są w operatorze rzutowym do konstrukcji funkcji bazowych w przestrzeni wibracyjno-rotacyjnej.

Ponieważ charaktery dla elementów sprzężonych (dwa elementy grupy g_1 i g_2 nazywamy sprzężonymi, jeżeli istnieje element grupy h: $g_1 = hg_2h^{-1}$, [58]) są identyczne, zatem tabele charakterów można przedstawić korzystając z tzw. klas elementów sprzężonych $\mathcal{C}_i$, dla których wartości $\chi(g)$, $g \in \mathcal{C}_i$ są identyczne (i oznacza numer klasy $\mathcal{C}_i$).

Tabela charakterów dla grupy O składa się z pięciu klas elementów sprzężonych:

(i) do klasy $\mathcal{C}_1$ należy element jednostkowy grupy

$$\mathcal{C}_1 = \{E\}, \tag{493}$$

[9]Wektory bazowe rozpinające niezmiennicze podprzestrzenie można wybrać na różne sposoby. Oprócz podanych powyżej baz nieprzywiedlnych reprezentacji można również przyjąć następujące wektory bazowe dla reprezentacji T_1: S_x, S_y, S_z. Transformują się one odpowiednio jak x, y, z, ale nie zmieniają znaku przy inwersji przestrzennej. Ponieważ w grupie O nie występuje inwersja, zatem działając tą grupą na bazę S_x, S_y, S_z otrzymujemy identyczny wynik jak dla bazy x, y, z. Dla T_1 można utworzyć dodatkowo bazy składające się z wyższych potęg zmiennych kartezjańskich [12]: jedną z możliwości jest x^3, y^3, z^3 albo $x(y^2 + z^2), y(x^2 + z^2), z(x^2 + y^2)$. W przypadku reprezentacji T_2 z [12] mamy: $x(z^2 - y^2), z(y^2 - x^2), y(z^2 - x^2)$.

(ii) klasa $\mathcal{C}_2$ zawiera obroty o kąt $\frac{2}{3}\pi$ wokół osi łączących środek sześcianu z jego wierzchołkami:

$$\mathcal{C}_2 = \{C_{3\alpha}, C_{3\beta}, C_{3\gamma}, C_{3\delta}, C_{3\alpha}^{-1}, C_{3\beta}^{-1}, C_{3\gamma}^{-1}, C_{3\delta}^{-1}\}, \tag{494}$$

(iii) klasa $\mathcal{C}_3$ zawiera obroty o kąt π wokół osi układu współrzędnych OX, OY, OZ:

$$\mathcal{C}_3 = \{C_{2x}, C_{2y}, C_{2z}\}, \tag{495}$$

(iv) klasa $\mathcal{C}_4$ zawiera obroty o kąt $\frac{1}{2}\pi$ wokół osi układu współrzędnych OX, OY, OZ:

$$\mathcal{C}_4 = \{C_{4x}, C_{4y}, C_{4z}, C_{4x}^{-1}, C_{4y}^{-1}, C_{4z}^{-1}\}, \tag{496}$$

(v) klasa $\mathcal{C}_5$ zawiera obroty o kąt π wokół osi łączących środek sześcianu ze środkami jego krawędzi:

$$\mathcal{C}_5 = \{C_{2a}, C_{2b}, C_{2c}, C_{2d}, C_{2e}, C_{2f}\}. \tag{497}$$

Tabela charakterów dla grupy O umieszczona w [2] przedstawiona jest w tablicy 21.

Reprezentacja grupy O	$\mathcal{C}_1$	$\mathcal{C}_2$	$\mathcal{C}_3$	$\mathcal{C}_4$	$\mathcal{C}_5$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
E	2	-1	2	0	0
$T1$	3	0	-1	1	-1
$T2$	3	0	-1	-1	1

Tablica 21: Tabela charakterów dla grupy O.

Istotnym pojęciem używanym w obliczeniach jest iloczyn Kroneckera reprezentacji oraz jego rozkład na nieprzywiedlne reprezentacje. Potrzebne iloczyny Kroneckera dla grupy O przedstawione są w tabeli 22, oraz w [9, 10, 11, 12].

A.2 Grupa $D_{4;y}$

W żadnej z publikacji [9, 10, 11] i [2] nie ma pełnej konstrukcji reprezentacji grupy D_4. Korzystając z zawartych tam informacji, po uzgodnieniu różnych konwencji używanych w tych pracach, w dodatku A.2 pokazujemy konsekwentny opis baz i reprezentacji tej grupy. Istotną różnicą pomiędzy przedstawioną grupą D_4 w [9, 10, 11] a [2] jest wybór osi czterokrotnej. W

A_1	A_2	E	T_1	T_2	
A_1	A_2	E	T_1	T_2	A_1
	A_1	E	T_2	T_1	A_2
		$A_1 + A_2 + E$	$T_1 + T_2$	$T_1 + T_2$	E
			$A_1 + E + T_1 + T_2$	$A_2 + E + T_1 + T_2$	T_1
				$A_1 + E + T_1 + T_2$	T_2

Tablica 22: Tabela iloczynów Kroneckera nieprzywiedlnych reprezentacji dla grupy O.

pierwszych trzech podanych pracach osią czterokrotną jest oś OZ, zaś w [2] jest nią oś OY. Do rozróżnienia obu grup został dodatkowo wprowadzony drugi indeks dolny, który oznacza oś czterokrotną. Zatem w przypadku grupy D_4 przedstawionej w [9, 10, 11] używane jest oznaczenie $D_{4;z}$, a dla grupy przedstawionej w [2] mamy $D_{4;y}$.

W dalszej części tego dodatku jest przedstawiona dokładniej grupa $D_{4;y}$, która jest antyizomorfoczna z grupą symetryzacji otrzymaną dla rzeczywistych zmiennych wewnętrznych kwadrupolowych i oktupolowych używanych w modelu (R). Do konstrukcji stanów z tego modelu potrzebna jest znajomość bazy w zmiennych kartezjańskich oraz odpowiadające im macierze nieprzywiedlnych reprezentacji. Dodatkowo trzeba pamiętać, że definicja obrotów używana w obliczeniach jest zgodna z przedstawioną w [49].

Korzystając z pracy [2] dla grupy $D_{4;y}$ znamy jedynie postać macierzy reprezentacji. Naszym celem było znalezienie wektorów bazowych reprezentacji w zmiennych kartezjańskich transformujących się zgodnie z tymi macierzami. Do ich konstrukcji zostały wykorzystane bazy przedstawione w [9, 10, 11] uzyskane dla grupy $D_{4;z}$. Wiedząc, że grupa $D_{4;y}$ powstaje z grupy $D_{4;z}$ przez obrót o kąt $-\frac{\pi}{2}$ wokół osi OX można otrzymać wektory bazowe na dwa sposoby:

(a) obracając funkcje bazowe przedstawione w [9, 10, 11] o kąt $-\frac{\pi}{2}$ wokół osi OX,

(b) znając budowę funkcji bazowych z [9, 10, 11] można stworzyć wszystkie możliwe kombinacje iloczynów zmiennych kartezjańskich im odpowiadających i zrzutować je na nieprzywiedlne reprezentacje wykorzytując macierze przedstawione w [2].

W naszym przypadku wykorzystana jest druga z możliwości, co zostało przedstawione dokładniej w dalszej części.

Korzystając z [9] oraz [10, 11] grupa $D_{4;z}$ posiada następującą bazę kar-

tezjańską dla poszczególnych nieprzywiedlnych reprezentacji:

$$\begin{aligned} A_1: &\quad x^2+y^2, \\ A_2: &\quad z, \\ B_1: &\quad x^2-y^2, \\ B_2: &\quad xy, \\ E: &\quad x, y, \end{aligned} \tag{498}$$

gdzie A_1, A_2, A_B, B_2 są reprezentacjami jednowymiarowymi, a E jest reprezentacją dwuwymiarową.[10]

Używając operatora rzutowego dla grupy $D_{4;y}$ opisanego za pomocą charakterów można znaleźć bazę dla reprezentacji jednowymiarowych. Rzutując kombinację liniową funkcji $x,\ y,\ z$: $a_x x + a_y y + a_z z$, gdzie $a_x,\ a_y,\ a_z$ są szukanymi współczynnikami, została uzyskana baza dla reprezentacji jednowymiarowej A_2 w postaci funkcji y. Dodatkowo okazało się, że powyższa kombinacja daje niezerowy rzut na dwuwymiarową reprezentację E. W tym przypadku, aby uzyskać bazę kartezjańską, której odpowiadają macierze przedstawione w [2], został użyty operator rzutowy zbudowany z wymienionych macierzy. Do kombinacji liniowej $a_x x + a_y y + a_z z$ najpierw został użyty operator P^E_{11}, gdzie dolne indeksy numerują elementy użytych macierzy reprezentacji [2], co dało po zrzutowaniu wektor bazowy x. Następnie, zgodnie z regułą przedstawioną w [77], dla wektora x został użyty operator P^E_{21}. W ten sposób został otrzymany drugi wektor bazowy reprezentacji E: z. Dla reprezentacji A_1 i B_1 baza została otrzymana z rzutu kombinacji liniowych $a_x x^2 + a_y y^2 + a_z z^2$ co dało:

(i) dla reprezentacji A_1 zostały otrzymane dwie bazy: y^2 oraz $x^2 + z^2$,

(ii) dla reprezentacji B_1 została otrzymana jedna baza składająca się z wektora: $x^2 - z^2$.

Kolejną kombinacją jaka została rozważona, jest kombinacją dwumianów $a_{xy}xy + a_{xz}xz + a_{yz}yz$. Niezerowe rzuty zostały otrzymane dla dwóch reprezentacji B_2 oraz E. Dla reprezentacji jednowymiarowej B_2 baza ma postać xz. W przypadku dwuwymiarowej reprezentacji E zostały uzyskane następujące wektory bazowe: xy oraz yz.

[10]Podobnie jak dla grupy O bazy dla nieprzywiedlnych reprezentacji grupy $D_{4;z}$ możemy zapisać na różne sposoby. Korzystając z [9, 10, 11, 12] mamy następujące dodatkowe bazy dla reprezentacji nieprzywiedlnych: dla A_1: z^2, dla A_2: S_z albo z^3 albo $z^2(x^2+y^2)$, dla B_1: xyz, dla B_2: $z^2(x^2-y^2)$ oraz dla E: S_x, S_y albo xz, yz albo xz^2, yz^2 albo xy^2, yx^2 albo x^3, y^3.

Poniżej przedstawione są tabele działania grupy $D_{4;y}$, [2], na otrzymaną bazę kartezjańską:

(i) reprezentacja A_1 z wektorem bazowym $v = y^2$ lub $v = x^2 + z^2$:

$g \in D_{4;y}$	E	C_{2x}	C_{2y}	C_{2z}	C_{4y}	C_{4y}^{-1}	C_{2c}	C_{2d}
gv	v	v	v	v	v	v	v	v

(ii) reprezentacja B_1 z wektorem bazowym $v = x^2 - z^2$:

$g \in D_{4;y}$	E	C_{2x}	C_{2y}	C_{2z}	C_{4y}	C_{4y}^{-1}	C_{2c}	C_{2d}
gv	v	v	v	v	$-v$	$-v$	$-v$	$-v$

(iii) reprezentacja A_2 z wektorem bazowym $v = y$:

$g \in D_{4;y}$	E	C_{2x}	C_{2y}	C_{2z}	C_{4y}	C_{4y}^{-1}	C_{2c}	C_{2d}
gv	v	$-v$	v	$-v$	v	v	$-v$	$-v$

(iv) reprezentacja B_2 z wektorem bazowym $v = xz$:

$g \in D_{4;y}$	E	C_{2x}	C_{2y}	C_{2z}	C_{4y}	C_{4y}^{-1}	C_{2c}	C_{2d}
gv	v	$-v$	v	$-v$	$-v$	$-v$	v	v

(v) reprezentacja E z wektorami bazowymi $v_1 = x$, $v_2 = z$:

$g \in D_{4;y}$	E	C_{2x}	C_{2y}	C_{2z}	C_{4y}	C_{4y}^{-1}	C_{2c}	C_{2d}
gv_1	v_1	v_1	$-v_1$	$-v_1$	v_2	$-v_2$	v_2	$-v_2$
gv_2	v_2	$-v_2$	$-v_2$	v_2	$-v_1$	v_1	v_1	$-v_1$

Znając powyższe działania można odtworzyć macierze reprezentacji, które są zgodne z [2].

Tablica charakterów dla grupy $D_{4;y}$ przedstawiona jest w tablicy 23.

Reprezentacja grupy $D_{4;y}$	$\mathcal{C}_1$	$\mathcal{C}_2$	$\mathcal{C}_3$	$\mathcal{C}_4$	$\mathcal{C}_5$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
B_1	1	1	-1	1	-1
B_2	1	1	-1	-1	1
E	2	-2	0	0	0

Tablica 23: Tabela charakterów dla grupy $D_{4;y}$.

Poszczególne klasy elementów sprzężonych składają się z następujących obrotów:

(i) do klasy $\mathcal{C}_1$ należy element jednostrowy grupy:

$$\mathcal{C}_1 = \{E\}, \tag{499}$$

(ii) klasa $\mathcal{C}_2$ zawiera obrót o kąt π wokół osi OY:

$$\mathcal{C}_2 = \{C_{2y}\}, \tag{500}$$

(iii) klasa $\mathcal{C}_3$ zawiera obroty o kąt $\frac{1}{2}\pi$ wokół osi OY:

$$\mathcal{C}_3 = \{C_{4y}, C_{4y}^{-1}\}, \tag{501}$$

(iv) klasa $\mathcal{C}_4$ zawiera obroty o kąt π wokół osi OX i OZ:

$$\mathcal{C}_4 = \{C_{2x}, C_{2z}\}, \tag{502}$$

(v) klasa $\mathcal{C}_5$ zawiera obroty o kąt π wokół osi łączących środek sześcianu ze środkiem jego krawędzi:

$$\mathcal{C}_5 = \{C_{2c}, C_{2d}\}. \tag{503}$$

Iloczyny Kroneckera nieprzywiedlnych reprezentacji dla omawianej grupy przedstawione są w tabeli 24, [9, 10, 11]:

A_1	A_2	B_1	B_2	E	
A_1	A_2	B_1	B_2	E	A_1
	A_1	B_2	B_1	E	A_2
		A_1	A_2	E	B_1
			A_1	E	B_2
				$A_1 + A_2 + B_1 + B_2$	E

Tablica 24: Tabela iloczynów Kroneckera nieprzywiedlnych reprezentacji dla grupy $D_{4;y}$.

A.3 Wybrane grupy punktowe

W tej części przedstawione są elementy grup punktowych otrzymanych w rodziale 3. Uzyskane grupy symetryzacji odpowiadają grupom przedstawionym w [2].
Grupa $\overline{D}_{4h;z}$ z osią główną OZ składa się z następujących elementów:
$E, C_{2x}, C_{2y}, C_{2z}, C_{2a}, C_{2b}, C_{4z}, C_{4z}^{-1}, I, IC_{2x}, IC_{2y}, IC_{2z}, IC_{2a}, IC_{2b}, IC_{4z}, IC_{4z}^{-1}$,

grupa $\overline{D}_2$ posiada cztery obroty: $E, C_{2x}, C_{2y}, C_{2z}$,
grupa $\overline{R_z(\frac{\pi}{4})OR_z(-\frac{\pi}{4})}$ składa się z elementów grupy $\overline{O}$ obróconych o kąt $\frac{\pi}{4}$ względem osi OZ, gdzie
$\overline{O} = \{E, C_{2x}, C_{2y}, C_{2z}, C_{3\alpha}, C_{3\beta}, C_{3\gamma}, C_{3\delta}, C_{3\alpha}^{-1}, C_{3\beta}^{-1}, C_{3\gamma}^{-1}, C_{3\delta}^{-1},$
$C_{4x}, C_{4x}^{-1}, C_{4y}, C_{4y}^{-1}, C_{4z}, C_{4z}^{-1}, C_{2a}, C_{2b}, C_{2c}, C_{2d}, C_{2e}, C_{2f}\}$,
oraz grupa $\overline{O}_h$ składa się z obrotów:
$E, C_{2x}, C_{2y}, C_{2z}, C_{3\alpha}, C_{3\beta}, C_{3\gamma}, C_{3\delta}, C_{3\alpha}^{-1}, C_{3\beta}^{-1}, C_{3\gamma}^{-1}, C_{3\delta}^{-1}, C_{4x}, C_{4x}^{-1}, C_{4y}, C_{4y}^{-1},$
$C_{4z}, C_{4z}^{-1}, C_{2a}, C_{2b}, C_{2c}, C_{2d}, C_{2e}, C_{2f}, I, IC_{2x}, IC_{2y}, IC_{2z}, IC_{3\alpha}, IC_{3\beta}, IC_{3\gamma},$
$IC_{3\delta}, IC_{3\alpha}^{-1}, IC_{3\beta}^{-1}, IC_{3\gamma}^{-1}, IC_{3\delta}^{-1}, IC_{4x}, IC_{4x}^{-1}, IC_{4y}, IC_{4y}^{-1}, IC_{4z}, IC_{4z}^{-1},$
$IC_{2a}, IC_{2b}, IC_{2c}, IC_{2d}, IC_{2e}, IC_{2f}$.

Innymi grupami są:

(i) $\overline{C}_{s;x} = \{E, IC_{2x}\}$, $\overline{C}_{s;y} = \{E, IC_{2y}\}$ oraz przedstawiona w [2] $\overline{C}_{s;z} = \{E, IC_{2z}\}$, dla których zachodzi $\mathcal{R}_y(\frac{\pi}{2})\overline{C}_{s;z}\mathcal{R}_y(-\frac{\pi}{2}) = \overline{C}_{s;x}$ i $\mathcal{R}_x(\frac{\pi}{2})\overline{C}_{s;z}\mathcal{R}_x(-\frac{\pi}{2}) = \overline{C}_{s;y}$,

(ii) $\overline{S}_{4;z} = \{E, C_{2z}, IC_{4z}, IC_{4z}^{-1}\}$, którą można uzyskać z grupy $\overline{S}_{4;y} = \{E, C_{2y}, IC_{4y}, IC_{4y}^{-1}\}$ przedstawionej w [2] przez obrót o kąt $\frac{\pi}{2}$ wokół osi OX, tj. $\mathcal{R}_x(\frac{\pi}{2})\overline{S}_{4;y}\mathcal{R}_x(-\frac{\pi}{2}) = \overline{S}_{4;z}$,

(iii) $\overline{C}_{2v} = \{E, C_{2z}, IC_{2x}, IC_{2y}\}$, $\overline{C}_{2v} = \{E, C_{2z}, IC_{2a}, IC_{2b}\}$,

(iv) $\overline{D}_{2d;z} = \{E, C_{2z}, C_{2a}, C_{2b}, IC_{2x}, IC_{2y}, IC_{4z}, IC_{4z}^{-1}\}$,
$\overline{D}_{2d;z} = \{E, C_{2x}, C_{2y}, C_{2z}, IC_{2a}, IC_{2b}, IC_{4z}, IC_{4z}^{-1}\}$.

Okazuje się, że dla kąta $\Omega_3 \in \{0, \frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{4}, \pi, \frac{5\pi}{4}, \frac{3\pi}{2}, \frac{7\pi}{4}\}$ otrzymujemy $R_z(\Omega_3)\overline{D}_{4;z}R_z(-\Omega_3) = \overline{D}_{4;z}$. Analogiczna równość zachodzi dla $\overline{D}_2 = R_z(\Omega_3)\overline{D}_2R_z(-\Omega_3)$, gdzie $\Omega_3 = \frac{k\pi}{2}$, $k \in \mathbb{Z}$. Dla obróconej grupy $\overline{O}$ o kąty $\Omega_3 = \frac{\pi}{4}, \frac{3}{4}\pi, \frac{5}{4}\pi, \frac{7}{4}\pi$ wokół osi OZ, $R_z(\Omega_3)\overline{O}R_z(-\Omega_3)$, otrzymujemy tę samą grupę, tj. $\overline{O}$.

B Funkcje bazowe dla grupy symetryzacji $\overline{O}$

W tym dodatku przedstawione są funkcje bazowe w przestrzeni wibracyjno-rotacyjnej, otrzymane dla grupy symetryzacji $\overline{O}$. Dodatkowo podane są wektory bazowe w zmiennych kartezjańskich transformujące się identycznie jak funkcje bazowe w przestrzeni wibracyjno-rotacyjnej.

Każdy z wektorów bazowych otrzymany jest za pomocą operatora rzutowego na odpowiednią nieprzywiedlną reprezentację grupy $\overline{O}$.

B.1 Funkcje rotacyjne

Funkcje rotacyjne utworzone są zgodnie z łańcuchem grupowym $\overline{O} \supset \overline{D}_2$, tj. funkcje należą jednocześnie do pewnej reprezentacji grupy $\overline{D}_2$ oraz $\overline{O}$. Konstrukcja tych funkcji polegała na znalezieniu kombinacji liniowych sprzężonych funkcji Wignera $D^J_{MK}(\Omega)^*$, dla określonej wartości J, należących do reprezentacji grupy $\overline{D}_2$. Następnie, z otrzymanych funkcji należących do określonej reprezentacji grupy $\overline{D}_2$, utworzone zostały funkcje bazowe z reprezentacji grupy $\overline{O}$.

Biorąc pod uwagę budowę funkcji rotacyjnych wprowadziliśmy następujące oznaczenie, [57]:

$$R^{J\,M}_{\Gamma_3\,\Gamma'_3}(\Omega), \tag{504}$$

gdzie Γ_3 jest nieprzywiedlną reprezentacją grupy $\overline{O}$, a Γ'_3 grupy $\overline{D}_2$. W przypadku, gdy dwa różne wektory należą do równoważnych reprezentacji grupy $\overline{O}$ oraz $\overline{D}_2$, wówczas wprowadzane jest dodatkowe oznaczenia określające wartość indeksu K, tj. $R^{J\,M}_{\Gamma_3\,\Gamma'_3\,K}(\Omega)$.

Każda z funkcji (504) zbudowana jest z kombinacji liniowych sprzężonych funkcji Wignera $D^J_{MK}(\Omega)^*$:

$$r^J_{MK}(\Omega) \;=\; \sqrt{2J+1}D^J_{MK}(\Omega)^*, \tag{505}$$

gdzie działanie grupy $\overline{G}$ na $r^J_{MK}(\Omega)$ opisuje wzór:

$$\overline{g}r^J_{MK}(\Omega) = r^J_{MK}(\Omega g^{-1}) = \sum_{K'} D^J_{KK'}(g) r^J_{MK'}(\Omega),\ \overline{g} \in G. \tag{506}$$

Aby uprościć zapis dodatkowo korzystamy z następujących funkcji:

$$r^{(+)J}_{MK}(\Omega) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2(1+\delta_{K0})}}(r^J_{MK} + r^J_{M-K}), K \geq 0, \tag{507}$$

$$r^{(-)J}_{MK}(\Omega) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}(r^J_{MK} - r^J_{M-K}), K > 0. \tag{508}$$

Baza dla reprezentacji $\overline{D}_2$ otrzymana jest z funkcji $r^{(+)J}_{MK}(\Omega)$ i $r^{(-)J}_{MK}(\Omega)$, dla których działanie grupy $\overline{D}_2$ jest następujące:

$$E r^{(+)J}_{MK}(\Omega) = r^{(+)J}_{MK}(\Omega), \tag{509}$$

$$C_{2x} r^{(+)J}_{MK}(\Omega) = (-1)^J\, r^{(+)J}_{MK}(\Omega), \tag{510}$$

$$C_{2y} r^{(+)J}_{MK}(\Omega) = (-1)^{J-K}\, r^{(+)J}_{MK}(\Omega), \tag{511}$$

$$C_{2z} r^{(+)J}_{MK}(\Omega) = (-1)^K\, r^{(+)J}_{MK}(\Omega), \tag{512}$$

oraz:

$$Er^{(-)J}_{MK}(\Omega) = r^{(-)J}_{MK}(\Omega), \tag{513}$$

$$C_{2x}r^{(-)J}_{MK}(\Omega) = (-1)^{J+1}\, r^{(-)J}_{MK}(\Omega), \tag{514}$$

$$C_{2y}r^{(-)J}_{MK}(\Omega) = (-1)^{J-K+1}\, r^{(-)J}_{MK}(\Omega), \tag{515}$$

$$C_{2z}r^{(-)J}_{MK}(\Omega) = (-1)^{K}\, r^{(-)J}_{MK}(\Omega). \tag{516}$$

Ponieważ grupa $\overline{D}_2$ nie zmienia $|K|$ przy działaniu na $r^{(+)J}_{MK}(\Omega)$, więc szukając wektorów bazowych dla reprezentacji tej grupy wystarczy rozważyć samą funkcje $r^{(+)J}_{MK}(\Omega)$, a nie ich sumę po K. Analogicznie mamy dla $r^{(-)J}_{MK}(\Omega)$.

Po zrzutowaniu na nieprzywiedlne reprezentacje grupy $\overline{D}_2$ mamy następujące wektory bazowe:

(i) dla reprezentacji A_1:

$$r^{(+)J}_{MK}(\Omega): \quad J \in 2\mathbb{N}_0 \wedge K \in 2\mathbb{N}_0, \tag{517}$$

$$r^{(-)J}_{MK}(\Omega): \quad J \in 2\mathbb{N}_0 + 1 \wedge K \in 2\mathbb{N}_0, \tag{518}$$

(ii) dla reprezentacji B_1:

$$r^{(+)J}_{MK}(\Omega): \quad J \in 2\mathbb{N}_0 \wedge K \in 2\mathbb{N}_0 + 1, \tag{519}$$

$$r^{(-)J}_{MK}(\Omega): \quad J \in 2\mathbb{N}_0 + 1 \wedge K \in 2\mathbb{N}_0 + 1, \tag{520}$$

(iii) dla reprezentacji B_2:

$$r^{(+)J}_{MK}(\Omega): \quad J \in 2\mathbb{N}_0 + 1 \wedge K \in 2\mathbb{N}_0, \tag{521}$$

$$r^{(-)J}_{MK}(\Omega): \quad J \in 2\mathbb{N}_0 \wedge K \in 2\mathbb{N}_0, \tag{522}$$

(iv) dla reprezentacji B_3:

$$r^{(+)J}_{MK}(\Omega): \quad J \in 2\mathbb{N}_0 + 1 \wedge K \in 2\mathbb{N}_0 + 1, \tag{523}$$

$$r^{(-)J}_{MK}(\Omega): \quad J \in 2\mathbb{N}_0 \wedge K \in 2\mathbb{N}_0 + 1, \tag{524}$$

gdzie $\mathbb{N}$ oznacza zbiór liczb naturalnych zaczynających się od jedynki, a $\mathbb{N}_0$ zbiór liczb naturalnych zawierających dodatkowo liczbę 0.

Bazy dla grupy $\overline{O} \supset \overline{D}_2$ opisane są przy pomocy wcześniej wprowadzonych oznaczeń $R^{J\,M}_{\Gamma_3\,\Gamma'_3}(\Omega)$ lub $R^{J\,M}_{\Gamma_3\,\Gamma'_3\,K}(\Omega)$. Konstrukcja jest ograniczona do momentów pędu $J = 0, 1, 2, 3, 4, 5$.

Ponieważ działanie niektórych elementów grupy $\overline{O}$ zmienia wartość K w $r^J_{MK}(\Omega)$, zatem funkcje bazowe zostały otrzymane przez rzutowanie $\sum_{K=-J}^{J} a_K r^J_{MK}(\Omega)$ na poszczególne reprezentacje $\overline{O}$. Podane ponizej wektory bazowe są unormowane:

$$
\begin{aligned}
& J = 0 \\
R^{J=0M=0}_{A1A1K=0}(\Omega) &= r^{(+)0}_{00}(\Omega)
\end{aligned}
\tag{525}
$$

$$
\begin{aligned}
& J = 1 \\
R^{J=1M}_{T1B2K=0}(\Omega) &= r^{(+)1}_{M0}(\Omega), \\
R^{J=1M}_{T1B1K=1}(\Omega) &= r^{(-)1}_{M1}(\Omega), \\
R^{J=1M}_{T1B3K=1}(\Omega) &= r^{(+)1}_{M1}(\Omega),
\end{aligned}
\tag{526}
$$

$$
\begin{aligned}
& J = 2 \\
R^{J=2M}_{EA1K=0}(\Omega) &= r^{(+)2}_{M0}(\Omega), \\
R^{J=2M}_{EA1K=2}(\Omega) &= r^{(+)2}_{M2}(\Omega), \\
R^{J=2M}_{T2B1K=1}(\Omega) &= r^{(+)2}_{M1}(\Omega), \\
R^{J=2M}_{T2B2K=2}(\Omega) &= r^{(-)2}_{M2}(\Omega), \\
R^{J=2M}_{T2B3K=1}(\Omega) &= r^{(-)2}_{M1}(\Omega),
\end{aligned}
\tag{527}
$$

$$
\begin{aligned}
& J = 3 \\
R^{J=3M}_{A2A1K=2}(\Omega) &= r^{(-)3}_{M2}(\Omega), \\
R^{J=3M}_{T1B1}(\Omega) &= \frac{1}{\sqrt{8}}(\sqrt{3}r^{(-)3}_{M1}(\Omega) - \sqrt{5}r^{(-)3}_{M3}(\Omega)) \\
R^{J=3M}_{T1B2K=0}(\Omega) &= r^{(+)3}_{M0}(\Omega), \\
R^{J=3M}_{T1B3}(\Omega) &= \frac{1}{\sqrt{8}}(\sqrt{3}r^{(+)3}_{M1}(\Omega) + \sqrt{5}r^{(+)3}_{M3}(\Omega)), \\
R^{J=3M}_{T2B1}(\Omega) &= \frac{1}{\sqrt{8}}(-\sqrt{5}r^{(-)3}_{M1}(\Omega) - \sqrt{3}r^{(-)3}_{M3}(\Omega)), \\
R^{J=3M}_{T2B2K=2}(\Omega) &= r^{(+)3}_{M2}(\Omega), \\
R^{J=3M}_{T2B3}(\Omega) &= \frac{1}{\sqrt{8}}(-\sqrt{5}r^{(+)3}_{M1}(\Omega) + \sqrt{3}r^{(+)3}_{M3}(\Omega)),
\end{aligned}
\tag{528}
$$

$$J=4 \tag{529}$$

$$\begin{aligned}
R^{J=4M}_{A1A1}(\Omega) &= \sqrt{\frac{5}{12}}(r^{(+)4}_{M4}(\Omega)+\frac{\sqrt{35}}{5}r^{(+)4}_{M0}(\Omega)),\\
R^{J=4M}_{EA1}(\Omega) &= \sqrt{\frac{7}{12}}(r^{(+)4}_{M4}(\Omega)-\frac{\sqrt{35}}{7}r^{(+)4}_{M0}(\Omega)),\\
R^{J=4M}_{EA1K=2}(\Omega) &= r^{(+)4}_{M2}(\Omega),\\
R^{J=4M}_{T1B1}(\Omega) &= \frac{1}{\sqrt{8}}(r^{(+)4}_{M3}(\Omega)+\sqrt{7}r^{(+)4}_{M1}(\Omega)),\\
R^{J=4M}_{T1B2K=4}(\Omega) &= r^{(-)4}_{M4}(\Omega),\\
R^{J=4M}_{T1B3}(\Omega) &= \frac{1}{\sqrt{8}}(-r^{(-)4}_{M3}(\Omega)+\sqrt{7}r^{(-)4}_{M1}(\Omega),)\\
R^{J=4M}_{T2B1}(\Omega) &= \frac{1}{\sqrt{8}}(r^{(+)4}_{M1}(\Omega)-\sqrt{7}r^{(+)4}_{M3}(\Omega)),\\
R^{J=4M}_{T2B2K=2}(\Omega) &= r^{(-)4}_{M2}(\Omega),\\
R^{J=4M}_{T2B3}(\Omega) &= \frac{1}{\sqrt{8}}(r^{(-)4}_{M1}(\Omega)+\sqrt{7}r^{(-)4}_{M3}(\Omega)),
\end{aligned}$$

$$J=5 \tag{530}$$

$$\begin{aligned}
R^{J=5M}_{EA1K=4}(\Omega) &= r^{(-)5}_{M4}(\Omega),\\
R^{J=5M}_{EA1K=2}(\Omega) &= r^{(-)5}_{M2}(\Omega),\\
R^{J=5M}_{T1,1B1}(\Omega) &= \frac{1}{8\sqrt{2}}(-3\sqrt{7}r^{(-)5}_{M5}(\Omega)+\sqrt{35}r^{(-)5}_{M3}(\Omega)-\sqrt{30}r^{(-)5}_{M1}(\Omega)),\\
R^{J=5M}_{T1,1B2K=0}(\Omega) &= r^{(+)5}_{M0}(\Omega),\\
R^{J=5M}_{T1,1B3}(\Omega) &= \frac{1}{8\sqrt{2}}(3\sqrt{7}r^{(+)5}_{M5}(\Omega)+\sqrt{35}r^{(+)5}_{M3}(\Omega)+\sqrt{30}r^{(+)5}_{M1}(\Omega)),\\
R^{J=5M}_{T1,2B1}(\Omega) &= \frac{1}{16}(-\sqrt{10}r^{(-)5}_{M5}(\Omega)-9\sqrt{2}r^{(-)5}_{M3}(\Omega)-2\sqrt{21}r^{(-)5}_{M1}(\Omega)),\\
R^{J=5M}_{T1,2B2K=4}(\Omega) &= r^{(+)5}_{M4}(\Omega),\\
R^{J=5M}_{T1,2B3}(\Omega) &= \frac{1}{16}(\sqrt{10}r^{(+)5}_{M5}(\Omega)-9\sqrt{2}r^{(+)5}_{M3}(\Omega)+2\sqrt{21}r^{(+)5}_{M1}(\Omega)),\\
R^{J=5M}_{T2B1}(\Omega) &= \frac{\sqrt{7}}{4}(-\frac{\sqrt{210}}{14}r^{(-)5}_{M5}(\Omega)+r^{(-)5}_{M1}(\Omega)-\frac{\sqrt{42}}{14}r^{(-)5}_{M3}(\Omega)),\\
R^{J=5M}_{T2B2K=2}(\Omega) &= r^{(+)5}_{M2}(\Omega),\\
R^{J=5M}_{T2B3}(\Omega) &= \frac{\sqrt{7}}{4}(-\frac{\sqrt{210}}{14}r^{(+)5}_{M5}(\Omega)+r^{(+)5}_{M1}(\Omega)+\frac{\sqrt{42}}{14}r^{(+)5}_{M3}(\Omega)),
\end{aligned}$$

Rzutując kombinacje liniowe sprzężonych funkcji Wignera na reprezentacje T_1 grupy $\overline{O}$ otrzymujemy sześć wektorów bazowych:

$$r^5_{M0}(\Omega), r^5_{M4}(\Omega) + r^5_{M-4}(\Omega), r^5_{M5}(\Omega), r^5_{M-5}(\Omega), r^5_{M1}(\Omega), r^5_{M-1}(\Omega), \quad (531)$$

które należą do T_1. Chcąc otrzymać bazy dwóch równoważnych reprezentacji T_1 możemy wybrać jeden z wektorów, np. $r^5_{M0}(\Omega)$. Działając grupą $\overline{O}$ na ten wektor otrzymujemy trzy funkcje:

$$u_1 = r^5_{M0}(\Omega), \quad (532)$$

$$u_2 = 3\sqrt{7}\left(r^5_{M-5}(\Omega)+r^5_{M5}(\Omega)\right)+\sqrt{35}\left(r^5_{M-3}(\Omega)+r^5_{M3}(\Omega)\right)+ \\ +\sqrt{30}\left(r^5_{M-1}(\Omega)+r^5_{M1}(\Omega)\right), \quad (533)$$

$$u_3 = 3\sqrt{7}\left(-r^5_{M-5}(\Omega)+r^5_{M5}(\Omega)\right)-\sqrt{35}\left(-r^5_{M-3}(\Omega)+r^5_{M3}(\Omega)\right)+ \\ +\sqrt{30}\left(-r^5_{M-1}(\Omega)+r^5_{M1}(\Omega)\right), \quad (534)$$

które pod działaniem grupy symetryzacji przechodzą w swoje kombinacje, a zatem tworzą one bazę jednej z dwóch równoważnych reprezentacji T_1.

Można sprawdzić, że działanie grupy $\overline{O}$ na pozostałe wektory daje kombinacje liniowe tych wektorów. W ten sposób mamy drugą, równoważną, reprezentację T_1. Otrzymane wektory w każdej z równoważnych reprezentacji są ortonormalne względem siebie oraz względem wektorów z drugiej reprezentacji T_1.

Ponieważ konstrukcja stanów opiera się na składaniu iloczynów funkcji transformujących się zgodnie z odpowiednimi kombinacjami iloczynów funkcji przedstawionych w zmiennych kartezjańskich, zatem potrzebna jest informacja jak transformują się otrzymane funkcje bazowe w zmiennych kolektywnych. Poniżej przedstawione są rotacyjne funkcje bazowe, które odpowiadają wektorom bazowym otrzymanym w zmiennych kartezjańskich.

$\mathbf{J=0}$	Rep.	Baza dla funkcji rotacyjnych	Baza dla rep. grupy O
	A_1	$R^{J=0M=0}_{A1A1K=0}(\Omega)$	$x^2+y^2+z^2$

Tablica 25: Baza dla funkcji rotacyjnych dla grupy $\overline{O}$ o momencie pędu $J=0$

$\mathbf{J=1}$	Rep.	Baza dla funkcji rotacyjnych	Baza dla rep. grupy O
	T_1	$R^{J=1M}_{T1B1K=1}(\Omega)$	x
		$iR^{J=1M}_{T1B3K=1}(\Omega)$	y
		$-R^{J=1M}_{T1B2K=0}(\Omega)$	z

Tablica 26: Baza dla funkcji rotacyjnych dla grupy $\overline{O}$ o momencie pędu $J = 1$

$\mathbf{J=2}$	Rep.	Baza dla funkcji rotacyjnych	Baza dla rep. grupy O
	E	$R^{J=2M}_{EA1K=2}(\Omega)$	$\sqrt{3}(x^2-y^2)$
		$R^{J=2M}_{EA1K=0}(\Omega)$	$2z^2-x^2-y^2$
	T_2	$-R^{J=2M}_{T2B2K=2}(\Omega)$	xy
		$R^{J=2M}_{T2B1K=1}(\Omega)$	yz
		$-iR^{J=2M}_{T2B3K=1}(\Omega)$	xz

Tablica 27: Baza dla funkcji rotacyjnych dla grupy $\overline{O}$ o momencie pędu $J = 2$

$\mathbf{J=3}$	Rep.	Baza dla funkcji rotacyjnych	Baza dla rep. grupy O
	A_2	$R^{J=3M}_{A2A1K=2}(\Omega)$	xyz
	T_1	$R^{J=3M}_{T1B1}(\Omega)$	x
		$iR^{J=3M}_{T1B3}(\Omega)$	y
		$R^{J=3M}_{T1B2K=0}(\Omega)$	z
	T_2	$-R^{J=3M}_{T2B2K=2}(\Omega)$	xy
		$R^{J=3M}_{T2B1}(\Omega)$	yz
		$-iR^{J=3M}_{T2B3}(\Omega)$	xz

Tablica 28: Baza dla funkcji rotacyjnych dla grupy $\overline{O}$ o momencie pędu $J = 3$

$\mathbf{J=4}$	Rep.	Baza dla funkcji rotacyjnych	Baza dla rep. grupy O
	A_1	$R^{J=4M}_{A1A1}(\Omega)$	$x^2+y^2+z^2$
	E	$R^{J=4M}_{EA1K=2}(\Omega)$	$\sqrt{3}(x^2-y^2)$
		$R^{J=4M}_{EA1}(\Omega)$	$2z^2-x^2-y^2$
	T_1	$R^{J=4M}_{T1B1}(\Omega)$	x
		$iR^{J=4M}_{T1B3}(\Omega)$	y
		$R^{J=4M}_{T1B2K=4}(\Omega)$	z
	T_2	$R^{J=4M}_{T2B2K=2}(\Omega)$	xy
		$R^{J=4M}_{T2B1}(\Omega)$	yz
		$-iR^{J=4M}_{T2B3}(\Omega)$	xz

Tablica 29: Baza dla funkcji rotacyjnych dla grupy $\overline{O}$ o momencie pędu $J=4$

$\mathbf{J=5}$	Rep.	Baza dla funkcji rotacyjnych	Baza dla rep. grupy O
	E	$-R^{J=5M}_{EA1K=2}(\Omega)$	$\sqrt{3}(x^2-y^2)$
		$R^{J=5M}_{EA1K=4}(\Omega)$	$2z^2-x^2-y^2$
	$T_{1,1}$	$R^{J=5M}_{T1,1B1}(\Omega)$	x
		$-iR^{J=5M}_{T1,1B3}(\Omega)$	y
		$R^{J=5M}_{T1,1B2k=0}(\Omega)$	z
	$T_{1,2}$	$R^{J=5M}_{T1,2B1}(\Omega)$	x
		$-iR^{J=5M}_{T1,2B3}(\Omega)$	y
		$R^{J=5M}_{T1,2B2K=4}(\Omega)$	z
	T_2	$-R^{J=5M}_{T2B2K=2}(\Omega)$	xy
		$R^{J=5M}_{T2B1}(\Omega)$	yz
		$-iR^{J=5M}_{T2B3}(\Omega)$	xz

Tablica 30: Baza dla funkcji rotacyjnych dla grupy $\overline{O}$ o momencie pędu $J=5$

B.2 Funkcje kwadrupolowe

Funkcje kwadrupolowe powstały z rzutowania na reprezentacje grupy $\overline{O}$ iloczynów funkcji oscylatora harmonicznego postaci:

$$u_n(\eta_2, \alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20})u_m(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22}) \tag{535}$$

gdzie $n=0, m=0$ lub $n=1, m=0$ lub $n=0, m=1$ oraz

$$u_n(\eta, x) = \sqrt{\frac{\eta}{\sqrt{\pi}2^n n!}}\exp(-\frac{1}{2}\eta^2 x^2)H_n(\eta x). \tag{536}$$

Funkcja $H_n(\eta x)$ jest wielomianem Hermite'a, [79].

Funkcje kwadrupolowe otrzymane z funkcji początkowej $u_0(\eta_2; \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20}) u_0(\sqrt{2}\eta_2; \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22})$ przy rzucie na odpowiednie reprezentacje grupy $\overline{O}$:

(i) dla reprezentacji A_1:

$$\begin{aligned}
&\psi^{A_1}_{vib2}(\alpha_{20}, \alpha_{22}) = \sqrt{\tfrac{1}{N_{A_1}}} \times \\
&\Big\{ u_0\Big(\eta_2; \alpha_{20} + \tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big) u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2; \alpha_{22} + \tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20} - 2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big) \\
&+ u_0\Big(\eta_2; \alpha_{20} + \tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big) u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2; \alpha_{22} - \tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20} - 2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big) \\
&+ u_0\Big(\eta_2; \alpha_{20} + \tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big) u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2; \alpha_{22} + \tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20} + 2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big) \\
&+ u_0\Big(\eta_2; \alpha_{20} + \tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big) u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2; \alpha_{22} - \tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20} + 2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big) \\
&+ u_0\Big(\eta_2; \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20}\Big) u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2; \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22}\Big) + u_0\Big(\eta_2; \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20}\Big) u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2; \alpha_{22} + \mathring{\alpha}_{22}\Big) \Big\},
\end{aligned} \tag{537}$$

gdzie:

$$\begin{aligned}
N_{A_1} = \;& 6\big(1 + e^{-2\eta_2^2 \mathring{\alpha}_{22}^2} + 2e^{-\frac{3}{4}\eta_2^2(\mathring{\alpha}_{20}^2 + 2\mathring{\alpha}_{22}^2)} + e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20} - \sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2} \\
& + e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20} + \sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}\big),
\end{aligned} \tag{538}$$

(ii) dla reprezentacji A_2:

$$
\begin{aligned}
&\psi^{A_2}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22}) = \sqrt{\tfrac{1}{N_{A_2}}}\times \\
&\Big\{ - u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big) \\
&+u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big) \\
&+u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big) \\
&-u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big) \\
&+u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20}\big)\Big)u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big) - u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20}\big)\Big)u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\Big\},
\end{aligned}
\tag{539}
$$

gdzie:

$$
\begin{aligned}
N_{A_2} = \; & 6\big(1 - e^{-2\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2} + 2e^{-\frac{3}{4}\eta_2^2(\mathring{\alpha}_{20}^2+2\mathring{\alpha}_{22}^2)} - e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2} \\
& -e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}\big),
\end{aligned}
\tag{540}
$$

(iii) dla reprezentacji E mamy dwie funkcje bazowe:

$$\psi^E_{vib2;1}(\alpha_{20},\alpha_{22}) = \sqrt{\tfrac{1}{N_{E;1}}}\times$$
$$\Big\{ -u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)$$
$$-u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)$$
$$-u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)$$
$$-u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)$$
$$+2u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20}\Big)u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22}\Big)+2u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20}\Big)u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\mathring{\alpha}_{22}\Big)\Big\}, \tag{541}$$

gdzie:

$$N_{E;1} = 6\big(2+2e^{-2\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2}-2e^{-\frac{3}{4}\eta_2^2(\mathring{\alpha}_{20}^2+2\mathring{\alpha}_{22}^2)}-e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}$$
$$-e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}\big), \tag{542}$$

oraz

$$\psi^{E}_{vib2;2}(\alpha_{20},\alpha_{22}) = \sqrt{\tfrac{1}{N_{E;2}}}\times$$
$$\Big\{-u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)$$
$$+u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)$$
$$-u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)$$
$$+u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\Big\}, \tag{543}$$

gdzie:

$$N_{E;2} = 2\Big(2+2e^{-2\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2}-2e^{-\frac{3}{4}\eta_2^2(\mathring{\alpha}_{20}^2+2\mathring{\alpha}_{22}^2)}-e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}-e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}\Big). \tag{544}$$

Poniżej wypisane są otrzymane kwadrupolowe funkcje bazowe oraz odpowiadające im wektory bazowe w zmiennych kartezjańskich:

Rep.	Baza kwadrupolowa	Baza kartezjańska
A_1	$\psi^{A_1}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22})$	$x^2+y^2+z^2$
A_2	$\psi^{A_2}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22})$	xyz
E	$\psi^{E}_{vib2;2}(\alpha_{20},\alpha_{22})$	$\sqrt{3}(x^2-y^2)$
	$\psi^{E}_{vib2;1}(\alpha_{20},\alpha_{22})$	$2z^2-x^2-y^2$

Funkcje kwadrupolowe otrzymane z $u_1(\eta_2;\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20})u_0(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22})$ mają następującą postać:

(i) dla reprezentacji A_1 otrzymujemy:

$$\begin{gathered}
\psi^{A_1}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22}) = \sqrt{\tfrac{1}{N_{A_1}}}\times \\
\Big\{ -u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big)\times \\
\Big[u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)+u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big] \\
+\sqrt{3}u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big)\times \\
\Big[-u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)+u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big] \\
-u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big)\times \\
\Big[u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)+u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big] \\
+\sqrt{3}u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big)\times \\
\Big[-u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)+u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big] \\
+2u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20}\Big)\Big[u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22}\Big)+u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\mathring{\alpha}_{22}\Big)\Big]\Big\},
\end{gathered} \tag{545}$$

gdzie:

$$\begin{gathered}
N_{A_1} = 3\Big[8+8e^{-2\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2}-2e^{-\frac{3}{4}\eta_2^2(\mathring{\alpha}_{20}^2+2\mathring{\alpha}_{22}^2)}(4-9\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2+6\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2) \\
+e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}(-4+9\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2-6\sqrt{6}\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}\mathring{\alpha}_{22}+6\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2) \\
+e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}(-4+9\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2+6\sqrt{6}\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}\mathring{\alpha}_{22}+6\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2)\Big],
\end{gathered} \tag{546}$$

(ii) dla reprezentacji A_2 mamy:

$$\begin{aligned}
\psi^{A_2}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22}) = \sqrt{\tfrac{1}{N_{A_2}}} \times \\
\Big\{ - u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big) \times \\
\Big[- u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big) + u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big] \\
+\sqrt{3}u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big) \times \\
\Big[u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big) + u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big] \\
+u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big) \times \\
\Big[- u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big) + u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big] \\
-\sqrt{3}u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big) \times \\
\Big[u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big) + u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big] \\
+2u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20}\Big)\Big[u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22}\Big) - u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\mathring{\alpha}_{22}\Big)\Big]\Big\},
\end{aligned} \tag{547}$$

gdzie:

$$\begin{aligned}
N_{A_2} = 3\Big[8 - 8e^{-2\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2} - 2e^{-\frac{3}{4}\eta_2^2(\mathring{\alpha}_{20}^2+2\mathring{\alpha}_{22}^2)}(4-9\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2+6\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2) \\
-e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}(-4+9\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2-6\sqrt{6}\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}\mathring{\alpha}_{22}+6\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2) \\
-e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}(-4+9\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2+6\sqrt{6}\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}\mathring{\alpha}_{22}+6\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2)\Big],
\end{aligned} \tag{548}$$

(iii) dla reprezentacji E istnieją dwa wektory bazowe:

$$
\begin{gathered}
\psi^{E}_{vib2;1}(\alpha_{20},\alpha_{22}) = \sqrt{\tfrac{1}{N_{E;1}}} \times \\
\Big\{ u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big) \times \\
\Big[u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)+u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\Big] \\
-\sqrt{3}u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big) \times \\
\Big[-u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)+u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\Big] \\
+u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big) \times \\
\Big[u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)+u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\Big] \\
-\sqrt{3}u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big) \times \\
\Big[-u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)+u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\Big] \\
+4u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20}\Big)\Big[u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22}\Big)+u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\mathring{\alpha}_{22}\Big)\Big]\Big\},
\end{gathered}
\tag{549}
$$

gdzie:

$$
\begin{aligned}
N_{E;1} = \quad & 3\Big[16+16e^{-2\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2}+2e^{-\frac{3}{4}\eta_2^2(\mathring{\alpha}_{20}^2+2\mathring{\alpha}_{22}^2)}(4-9\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2+6\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2) \\
& -e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}(-4+9\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2-6\sqrt{6}\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}\mathring{\alpha}_{22}+6\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2) \\
& -e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}(-4+9\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2+6\sqrt{6}\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}\mathring{\alpha}_{22}+6\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2)\Big],
\end{aligned}
\tag{550}
$$

oraz

$$\begin{gathered}\psi^{E}_{vib2;2}(\alpha_{20},\alpha_{22}) = \sqrt{\tfrac{1}{N_{E;2}}}\sqrt{3}\times \\ \Big\{-u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\times \\ \Big[-u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)+u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\Big] \\ +\sqrt{3}u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\times \\ \Big[u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)+u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\Big] \\ +u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\times \\ \Big[u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)-u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\Big] \\ +\sqrt{3}u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\times \\ \Big[u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)+u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\Big]\Big\},\end{gathered} \tag{551}$$

gdzie:

$$N_{E;2} = N_{E;1}. \tag{552}$$

Poniżej wypisane są otrzymane kwadrupolowe funkcje bazowe oraz odpowiadające im wektory bazowe w zmiennych kartezjańskich:

Rep.	Baza kwadrupolowa	Baza kartezjańska
A_1	$\psi^{A_1}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22})$	$x^2+y^2+z^2$
A_2	$\psi^{A_2}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22})$	xyz
E	$\psi^{E}_{vib2;2}(\alpha_{20},\alpha_{22})$	$\sqrt{3}(x^2-y^2)$
	$\psi^{E}_{vib2;1}(\alpha_{20},\alpha_{22})$	$2z^2-x^2-y^2$

Funkcje kwadrupolowe otrzymane z $u_0(\eta_2;\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20})u_1(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22})$ mają następującą postać:

(i) dla reprezentacji A_1 mamy:

$$\begin{aligned}
&\psi^{A_1}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22}) = \sqrt{\tfrac{1}{N_{A_1}}}2\times\\
&\Big\{-\sqrt{3}u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\times\\
&\Big[u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)+u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\Big]\\
&+u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\times\\
&\Big[u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)-u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\Big]\\
&+\sqrt{3}u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\times\\
&\Big[u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)+u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\Big]\\
&-u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}\big(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\times\\
&\Big[u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)-u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22}\big)\Big)\Big]\\
&+2u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20}\Big)\Big[u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22}\Big)-u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\mathring{\alpha}_{22}\Big)\Big]\Big\},
\end{aligned} \tag{553}$$

gdzie:

$$\begin{aligned}
N_{A_1} = 12\Big[&8+8e^{-2\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2}(-1+4\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2)\\
&+2e^{-\frac{3}{4}\eta_2^2(\mathring{\alpha}_{20}^2+2\mathring{\alpha}_{22}^2)}(-4-3\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2+18\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2)\\
&+e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}(4+3\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2-2\sqrt{6}\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}\mathring{\alpha}_{22}+2\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2)\\
&+e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}(4+3\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2+2\sqrt{6}\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}\mathring{\alpha}_{22}+2\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2)\Big],
\end{aligned} \tag{554}$$

(ii) dla reprezentacji A_2 mamy:

$$
\begin{aligned}
\psi^{A_2}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22}) &= \sqrt{\tfrac{1}{N_{A_2}}}2\times\\
&\Big\{\sqrt{3}u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big)\times\\
&\Big[u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)-u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big]\\
&-u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big)\times\\
&\Big[u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)+u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big]\\
&-\sqrt{3}u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big)\times\\
&\Big[-u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)+u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big]\\
&-u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big)\times\\
&\Big[u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)+u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big]\\
&+2u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20}\Big)\Big[u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22}\Big)+u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\mathring{\alpha}_{22}\Big)\Big]\Big\},
\end{aligned}
\tag{555}
$$

gdzie:

$$
\begin{aligned}
N_{A_2} = 12\Big[&8-8e^{-2\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2}(-1+4\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2)\\
&+2e^{-\frac{3}{4}\eta_2^2(\mathring{\alpha}_{20}^2+2\mathring{\alpha}_{22}^2)}(-4-3\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2+18\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2)\\
&-e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}(4+3\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2-2\sqrt{6}\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}\mathring{\alpha}_{22}+2\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2)\\
&-e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}(4+3\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2+2\sqrt{6}\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}\mathring{\alpha}_{22}+2\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2)\Big],
\end{aligned}
\tag{556}
$$

(iii) dla reprezentacji E istnieją dwie funkcje bazowe:

$$\psi^{E}_{vib2;1}(\alpha_{20},\alpha_{22}) = \sqrt{\frac{1}{N_{E;1}}}2\times$$
$$\Big\{\sqrt{3}u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big)\times$$
$$\Big[u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)+u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big]$$
$$-u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big)\times$$
$$\Big[u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)-u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big]$$
$$-\sqrt{3}u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big)\times$$
$$\Big[u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)+u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big]$$
$$-u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big)\times$$
$$\Big[-u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)+u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big]$$
$$+4u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20}\Big)\Big[u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22}\Big)-u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\mathring{\alpha}_{22}\Big)\Big]\Big\}, \tag{557}$$

gdzie:

$$N_{E;1} = 12\Big[16+16e^{-2\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2}(-1+4\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2)$$
$$-2e^{-\frac{3}{4}\eta_2^2(\mathring{\alpha}_{20}^2+2\mathring{\alpha}_{22}^2)}(-4-3\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2+18\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2)$$
$$-e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}(4+3\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2-2\sqrt{6}\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}\mathring{\alpha}_{22}+2\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2)$$
$$-e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22})^2}(4+3\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}^2+2\sqrt{6}\eta_2^2\mathring{\alpha}_{20}\mathring{\alpha}_{22}+2\eta_2^2\mathring{\alpha}_{22}^2),\Big] \tag{558}$$

oraz

$$\psi^{E}_{vib2;2}(\alpha_{20},\alpha_{22}) = \sqrt{\tfrac{1}{N_{E;2}}}2\sqrt{3}\times$$
$$\Big\{ -\sqrt{3}u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big)\times$$
$$\Big[-u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)+u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big]$$
$$-u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big)\times$$
$$\Big[u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)+u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}-2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big]$$
$$-\sqrt{3}u_1\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big)\times$$
$$\Big[u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)-u_0\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big]$$
$$+u_0\Big(\eta_2;\alpha_{20}+\tfrac{1}{2}(\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\Big)\times$$
$$\Big[u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)+u_1\Big(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\Big)\Big]\Big\}, \tag{559}$$

gdzie:

$$N_{E;2} = N_{E;1}. \tag{560}$$

Poniżej wypisane są otrzymane kwadrupolowe funkcje bazowe oraz odpowiadające im kartezjańskie wektory bazowe:

Rep.	Baza kwadrupolowa	Baza kartezjańska
A_1	$\psi^{A_1}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22})$	$x^2+y^2+z^2$
A_2	$\psi^{A_2}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22})$	xyz
E	$\psi^{E}_{vib2;2}(\alpha_{20},\alpha_{22})$ $\psi^{E}_{vib2;1}(\alpha_{20},\alpha_{22})$	$\sqrt{3}(x^2-y^2)$ $2z^2-x^2-y^2$

B.3 Funkcje oktupolowe

Część oktupolowa zbudowana jest z iloczynów funkcji oscylatora harmonicznego, [79], zależnych od części rzeczywistych lub urojonych $\alpha_{3\mu} = \alpha'_{3\mu} + i\alpha''_{3\mu}$, gdzie $\mu = 0, \pm1, \pm2, \pm3$ oraz $\alpha'_{30} = \alpha_{30}$. Analogicznie jak dla kwadrupolowej części wibracyjnej, każda z funkcji opisująca oktupolową część wibracyjną jest co najwyżej jednofononowa. Dodatkowo wprowadzona jest deformacja statyczna $\pm\mathring{\alpha}''_{32} \in \mathbb{R}$ występująca w funkcji zmiennej tetraedralnej α''_{32}.

Funkcje oktupolowe o parzystości dodatniej z definicji spełniają równość:

$$\hat{I}\psi(\alpha_{3\nu}) = \psi(\alpha_{3\nu}), \tag{561}$$

gdzie $\hat{I}$ jest operatorem inwersji.

Dla grupy symetryzacji $\overline{O}$ zostały otrzymane następujące niezerowe funkcje oktupolowe o parzystości dodatniej:

(i) dla reprezentacji A_1:

$$\begin{aligned}\psi^{(+);A1}_{vib3}(\alpha_{3\nu}) = N_{A_1}\tfrac{1}{2}u_0(\eta_3;\alpha_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{32})\\ \times u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{33})\\ \times\{u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}-\mathring{\alpha}''_{32}) - u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}+\mathring{\alpha}''_{32})\},\end{aligned} \tag{562}$$

gdzie

$$N_{A_1} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{1+e^{-2\eta_3^2\mathring{\alpha}''^2_{32}}(-1+4\eta_3^2\mathring{\alpha}''^2_{32})}}, \tag{563}$$

(ii) dla reprezentacji T_1 mamy trzy funkcje bazowe:

$$\begin{aligned}\psi^{(+);T_1}_{vib3;1}(\alpha_{3\nu}) = N_{T;1}\frac{1}{2}u_0(\eta_3;\alpha_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{32})\\ \times u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{33})\\ \times\{u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}-\mathring{\alpha}''_{32}) - u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}+\mathring{\alpha}''_{32})\},\end{aligned} \tag{564}$$

$$\begin{aligned}\psi^{(+);T_1}_{vib3;2}(\alpha_{3\nu}) = \tfrac{N_{T;2}}{4}u_0(\eta_3;\alpha_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{32})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{31})\\ \times u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{33})\{u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}-\mathring{\alpha}''_{32}) - u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}+\mathring{\alpha}''_{32})\}\\ \times\{\sqrt{5}u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33}) + \sqrt{3}u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33})\},\end{aligned} \tag{565}$$

oraz

$$\psi^{(+);T_1}_{vib3;3}(\alpha_{3\nu}) = \tfrac{iN_{T;2}}{4}u_0(\eta_3;\alpha_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{32})$$
$$\times u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33})\{u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}-\mathring{\alpha}''_{32}) - u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}+\mathring{\alpha}''_{32})\}$$
$$\times\{\sqrt{3}u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{31})u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{33}) - \sqrt{5}u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{33})\}. \tag{566}$$

Współczynniki normalizujące mają postać:

$$N_{T;1} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{1-e^{-2\eta_3^2\mathring{\alpha}''^2_{32}}}}, \tag{567}$$

$$N_{T;2} = \frac{1}{\sqrt{1-e^{-2\eta_3^2\mathring{\alpha}''^2_{32}}}}. \tag{568}$$

(iii) dla reprezentacji T_2 mamy trzy funkcje bazowe:

$$\psi_{T^{(+);T_2}_{vib3;1}}(\alpha_{3\nu}) = N_{T;1}\tfrac{1}{2}u_1(\eta_3;\alpha_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{32})$$
$$\times u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{33})$$
$$\times\{u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}-\mathring{\alpha}''_{32}) - u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}+\mathring{\alpha}''_{32})\}, \tag{569}$$

$$\psi_{T^{(+);T_2}_{vib3;2}}(\alpha_{3\nu}) = N_{T;2}\tfrac{1}{4}u_0(\eta_3;\alpha_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{32})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{31})$$
$$\times u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{33})\{u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}-\mathring{\alpha}''_{32}) - u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}+\mathring{\alpha}''_{32})\}$$
$$\times\{\sqrt{5}u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33}) - \sqrt{3}u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33})\}, \tag{570}$$

oraz

$$\psi_{T^{(+);T_2}_{vib3;3}}(\alpha_{3\nu}) = N_{T;2}\tfrac{i}{4}u_0(\eta_3;\alpha_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{32})$$
$$\times u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33})\{u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}-\mathring{\alpha}''_{32}) - u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}+\mathring{\alpha}''_{32})\}$$
$$\times\{\sqrt{3}u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{33}) + \sqrt{5}u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{31})u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{33})\}, \tag{571}$$

gdzie współczynniki normalizujące mają postać:

$$N_{T;1} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{1-e^{-2\eta_3^2\mathring{\alpha}''^2_{32}}}} \tag{572}$$

i

$$N_{T;2} = \frac{1}{\sqrt{1-e^{-2\eta_3^2\mathring{\alpha}''^2_{32}}}}. \tag{573}$$

Poniżej wypisane są otrzymane oktupolowe funkcje bazowe o parzystości dodatniej oraz odpowiadające im wektory bazowe w zmiennych kartezjańskich:

Rep.	Baza dla funkcji oktupolowych, parzystość dodatnia	Baza kartezjańska
A_1	$\psi_{A_1}(\alpha_{3\nu})$	$x^2+y^2+z^2$
T_1	$\psi^{(+);T_1}_{vib3;2}(\alpha_{3\nu})$	S_x
	$-i\psi^{(+);T_1}_{vib3;3}(\alpha_{3\nu})$	S_y
	$\psi^{(+);T_1}_{vib3;1}(\alpha_{3\nu})$	S_z
T_2	$\psi^{(+);T_2}_{vib3;1}(\alpha_{3\nu})$	xy
	$-\psi^{(+);T_2}_{vib3;2}(\alpha_{3\nu})$	yz
	$-i\psi^{(+);T_2}_{vib3;3}(\alpha_{3\nu})$	xz

Tablica 31: Oktupolowe wektory bazowe o parzystości dodatniej dla grupy $\overline{O}$

Funkcje oktupolowe o parzystości ujemnej spełniają następująca równość:

$$I\psi(\alpha_{3\nu}) = -\psi(\alpha_{3\nu}). \tag{574}$$

Otrzymane niezerowe, oktupolowe funkcje o parzystości ujemnej należą do następujących reprezentacji grupy symetryzacji $\overline{O}$:

(i) dla reprezentacji A_2:

$$\begin{aligned}\psi_{A_2}(\alpha_{3\nu}) = N_{A_2}\tfrac{1}{2}u_0(\eta_3;\alpha_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{32})\\ \times u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{33})\\ \times\{u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}-\mathring{\alpha}''_{32})+u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}+\mathring{\alpha}''_{32})\},\end{aligned} \tag{575}$$

gdzie

$$N_{A_2} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{1+e^{-2\eta_3^2\mathring{\alpha}''^2_{32}}(1-4\eta_3^2\mathring{\alpha}''^2_{32})}}, \tag{576}$$

(ii) dla reprezentacji T_1 mamy trzy funkcje bazowe:

$$\begin{aligned}\psi^{(-);T_1}_{vib3;1}(\alpha_{3\nu}) = N_{T;1}\tfrac{1}{2}u_1(\eta_3;\alpha_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{32})\\ \times u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{33})\\ \times\{u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}-\mathring{\alpha}''_{32})+u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}+\mathring{\alpha}''_{32})\},\end{aligned} \tag{577}$$

$$\psi^{(-);T_1}_{vib3;2}(\alpha_{3\nu}) = N_{T;2}\tfrac{1}{4}u_0(\eta_3;\alpha_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{32})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha"_{31})$$
$$\times u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha"_{33})\{u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}-\mathring{\alpha}''_{32})+u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}+\mathring{\alpha}''_{32})\}$$
$$\times\{\sqrt{5}u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33})-\sqrt{3}u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33})\}, \tag{578}$$

oraz

$$\psi^{(-);T_1}_{vib3;3}(\alpha_{3\nu}) = N_{T;2}\tfrac{i}{4}u_0(\eta_3;\alpha_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{32})$$
$$\times u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33})\{u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}-\mathring{\alpha}''_{32})+u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}+\mathring{\alpha}''_{32})\}$$
$$\times\{\sqrt{3}u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{33})+\sqrt{5}u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{31})u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{33})\}. \tag{579}$$

Współczynniki normalizujące dla powyższych funkcji są następujące:

$$N_{T;1} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{1+e^{-2\eta_3^2\mathring{\alpha}''^2_{32}}}}, \tag{580}$$

$$N_{T;2} = \frac{1}{\sqrt{1+e^{-2\eta_3^2\mathring{\alpha}''^2_{32}}}}. \tag{581}$$

(iii) dla reprezentacji T_2 również mamy trzy funkcje bazowe postaci:

$$\psi^{(-);T_2}_{vib3;1}(\alpha_{3\nu}) = N_{T;1}\tfrac{1}{2}u_0(\eta_3;\alpha_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{32})$$
$$\times u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{33})$$
$$\times\{u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}-\mathring{\alpha}''_{32})+u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}+\mathring{\alpha}''_{32})\}, \tag{582}$$

$$\psi^{(-);T_2}_{vib3;2}(\alpha_{3\nu}) = N_{T;2}\tfrac{1}{4}u_0(\eta_3;\alpha_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{32})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{31})$$
$$\times u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{33})\{u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}-\mathring{\alpha}''_{32})+u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}+\mathring{\alpha}''_{32})\}$$
$$\times\{\sqrt{5}u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33})+\sqrt{3}u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33})\}, \tag{583}$$

oraz

$$\psi^{(-);T_2}_{vib3;3}(\alpha_{3\nu}) = N_{T;2}\tfrac{i}{4}u_0(\eta_3;\alpha_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{32})$$
$$\times u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha'_{33})\{u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}-\mathring{\alpha}''_{32})+u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{32}+\mathring{\alpha}''_{32})\}$$
$$\times\{\sqrt{3}u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{31})u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{33})-\sqrt{5}u_1(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3;\alpha''_{33})\}, \tag{584}$$

gdzie współczynniki normalizujące są postaci:

$$N_{T;1} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{1 + e^{-2\eta_3^2 \mathring{\alpha}_{32}''^2}}}, \tag{585}$$

$$N_{T;2} = \frac{1}{\sqrt{1 + e^{-2\eta_3^2 \mathring{\alpha}_{32}''^2}}}. \tag{586}$$

Poniżej wypisane są oktupolowe funkcje bazowe oraz odpowiadające im wektory bazowe w zmiennych kartezjańskich:

Rep.	Baza dla funkcji oktupolowych, parzystość ujemnej	Baza kartezjańska
A_2	$\psi_{A_2}(\alpha_{3\nu})$	xyz
T_1	$-\psi_{vib3;2}^{(-);T_1}(\alpha_{3\nu})$	S_x
	$-i\psi_{vib3;3}^{(-);T_1}(\alpha_{3\nu})$	S_y
	$\psi_{vib3;1}^{(-);T_1}(\alpha_{3\nu})$	S_z
T_2	$\psi_{vib3;1}^{(-);T_2}(\alpha_{3\nu})$	xy
	$\psi_{vib3;2}^{(-);T_2}(\alpha_{3\nu})$	yz
	$-i\psi_{vib3;3}^{(-);T_2}(\alpha_{3\nu})$	xz

Tablica 32: Oktupolowe wektory bazowe o parzystości ujemnej dla grupy $\overline{O}$

C Funkcje bazowe dla grupy symetryzacji $\overline{D}_{4;y}$

W tym dodatku przedstawiona jest budowa funkcji bazowych, z których składają się poszczególne stany użyte do konstrukcji modelu o zmiennych rzeczywistych (R). Funkcje bazowe podzielone są na trzy grupy: wektory bazowe kwadrupolowe, oktupolowe oraz rotacyjne. Funkcje bazowe części wibracyjnej pochodzą z rzutu odpowiedniej funkcji na reprezentacje grupy $\overline{D}_{4;y}$. Funkcje początkowe, z których powstały wektory bazowe są funkcjami oscylatorowymi posiadającymi deformacje statyczne w części kwadrupolowej i oktupolowej. Poza tym posiadają wzbudzenie występujące przy jednej z funkcji oscylatora harmonicznego, która wchodzi w jej skład. Wszystkie wektory bazowe jakie zostały uzyskane przez zrzutowanie funkcji początkowych są zaliczane do rodziny tej funkcji i tak są też określane w pracy. W przypadku części kwadrupolowej mamy trzy możliwe rodziny funkcji otrzymane odpowiednio z rzutu następujących funkcji:

(1) $u_0\big(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20}) u_0(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22}\big)$,

(2) $u_1\big(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20}) u_0(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22}\big)$,

(3) $u_0\big(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20}) u_1(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22}\big)$,

gdzie powyższe funkcje opisane są następującym wzorem $u_n(\eta, x) = \sqrt{\frac{\eta}{\sqrt{\pi}2^n n!}}$ $\times \exp(-\frac{1}{2}\eta^2 x^2) H_n(\eta x)$, a $H_n(\eta x)$ jest wielomianem Hermite'a, [79].

Każdy z niezerowych, kwadrupolowych wektorów bazowych należy do jednej z jednowymiarowej reprezentacji: A_1 lub B_1.

Dla części oktupolowej mamy cztery rodziny funkcji otrzymane z rzutowania funkcji początkowych na reprezentacje grupy $\overline{D}_{4;y}$:

(1) Z oktupolowej funkcji początkowej posiadającej wzbudzenie przy zmiennej α_{30}:

$$u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}) u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big) u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big) u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big).$$

(2) Z oktupolowej funkcji początkowej posiadającej wzbudzenie przy zmiennej α'_{31}:

$$u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}) u_1(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big) u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big) u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big).$$

(3) Z oktupolowej funkcji początkowej posiadającej wzbudzenie przy zmiennej α'_{32}:

$$u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}) u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big) u_1(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big) u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big).$$

(4) Z oktupolowej funkcji początkowej posiadającej wzbudzenie przy zmiennej α'_{33}:

$$u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}) u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big) u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big) u_1(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big).$$

Oznaczenia użyte do opisu funkcji oktupolowych są analogiczne jak dla części kwadrupolowej.

W przypadku grupy $\overline{D}_{4;y}$ okazało się, że oktupolowe funkcje początkowe nie posiadające żadnej parzystości po zrzutowaniu na nieprzywiedlne reprezentacje dają funkcje bazowe posiadające określoną parzystość dodatnią albo ujemną. Funkcje bazowe o parzystości dodatniej należą jedynie do jednowymiarowych reprezentacji, tj. A_1, A_2, B_1, B_2. Dla funkcji o parzystości ujemnej mamy jedynie dwuwymiarową reprezentację E.

Jak widać, dla części wibracyjnej zarówno kwadrupolowej jak i oktupolwej, każda z funkcji otrzymana jest z funkcji początkowej, gdzie występuje jedno wzbudzenie. Po zrzutowaniu funkcji początkowych na nieprzywiedlne reprezentacje pojawia się wzbudzenie również przy innych zmiennych niż to było dla funkcji początkowej. Jest to związane z działaniem grupy $\overline{D}_{4;y}$ na poszczególne zmienne przedstawionym w tabelach 33-35. Tak otrzymana baza dla części wibracyjnej niestety nie jest ortogonalna. Jednakże w obrębie danej rodziny funkcji wektory bazowe są względem siebie ortogonalne. Wynika to z przynależności tych funkcji do różnych reprezentacji. Jednak dla funkcji należących do tych samych reprezentacji, ale pochodzących z różnych funkcji początkowych ortogonalność nie zachodzi. Można by było ją uzyskać np. metodą Gramma-Schmita, jednak prowadziłoby to do bardziej skomplikowanej postaci kolejnej z uzyskanych funkcji. Z tego powodu została podjęta decyzja otrzymania bazy unormowanej, ale nie ortogonalnej dla części wibracyjnej.

W przypadku części rotacyjnej, skonstruowane wektory bazowe pochodzą z rzutu kombinacji liniowych sprzężonych funkcji Wignera uzyskanych dla określonego momentu pędu $J = 0, 1, 2, 3, 4, 5$. Analogicznie jak dla funkcji bazowych opisujących ruch wibracyjny funkcje rotacyjne są unormowane, ale nie muszą być ortogonalne względem drugiej reprezentacji równoważnej.

Dokładniejszy opis postaci operatora rzutowania oraz działania jego na funkcje początkowe zależne od zmiennych $\alpha_{\lambda\mu}$ przedstawiony jest w dodatku F.

W dalszej części przedstawione są wszystkie uzyskane umormowane wektory bazowe o parzystości dodatniej i ujemnej otrzymane dla $\overline{D}_{4;y}$.

C.1 Funkcje kwadrupolowe

Jak było wcześniej wspomniane kwadrupolowe funkcje bazowe otrzymane są z trzech funkcji początkowych.

Rodzina funcji kwadrupolowych otrzymanych z rzutu $u_0\big(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20}\big)u_0(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22})$:

(a) na reprezentację A_1:

$$\psi^{A_1}_{vib2}(\alpha_{20}, \alpha_{22}) = \tag{587}$$
$$\sqrt{\tfrac{1}{N_{A_1}}}\Big\{\tfrac{1}{2}u_0\big(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22}\big)$$
$$\tfrac{1}{2}u_0\big(\eta_2, \alpha_{20} - \tfrac{1}{2}(-\mathring{\alpha}_{20} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20} + 2\mathring{\alpha}_{22})\big)\Big\},$$

gdzie N_{A_1} wynosi $N_{A_1} = \frac{1}{2}\Big\{1 + e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2\left(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20} - \sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22}\right)^2}\Big\}$,

(b) na reprezentację B_1:

$$\psi^{B_1}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22}) = \tag{588}$$
$$\sqrt{\tfrac{1}{N_{B_1}}}\Big\{\tfrac{1}{2}u_0\big(\eta_2,\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_2,\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22}\big)-$$
$$\tfrac{1}{2}u_0\big(\eta_2,\alpha_{20}-\tfrac{1}{2}(-\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_2,\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\big)\Big\},$$

gdzie N_{B_1} wynosi $N_{B_1}=\frac{1}{2}\Big\{1-e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2\left(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22}\right)^2}\Big\}$.

Rodzina funcji kwadrupolowych otrzymanych z rzutu $u_1\big(\eta_2,\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20}\big)u_0(\sqrt{2}\eta_2,\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22}\big)$:

(a) na reprezentację A_1:

$$\psi^{A_1}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22}) = \tag{589}$$
$$\sqrt{\tfrac{1}{N_{A_1'}}}\Big\{\tfrac{1}{2}u_1\big(\eta_2,\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_2,\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22}\big)-$$
$$\tfrac{1}{4}u_1\big(\eta_2,\alpha_{20}-\tfrac{1}{2}(-\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_2,\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\big)+$$
$$\tfrac{\sqrt{3}}{4}u_0\big(\eta_2,\alpha_{20}-\tfrac{1}{2}(-\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_2,\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\big)\Big\},$$

gdzie N'_{A_1} wynosi:

$$N'_{A_1}=\tfrac{1}{16}e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2\left(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22}\right)^2} \tag{590}$$
$$\times\Big\{-4+8e^{\frac{1}{4}\eta_2^2\left(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22}\right)^2}+3\eta_2^2\big(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22}\big)^2\Big\},$$

(b) na reprezentację B_1:

$$\psi^{B_1}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22}) = \tag{591}$$
$$\sqrt{\tfrac{1}{N_{B_1'}}}\Big\{\tfrac{1}{2}u_1\big(\eta_2,\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_2,\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22}\big)+$$
$$\tfrac{1}{4}u_1\big(\eta_2,\alpha_{20}-\tfrac{1}{2}(-\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_2,\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\big)-$$
$$\tfrac{\sqrt{3}}{4}u_0\big(\eta_2,\alpha_{20}-\tfrac{1}{2}(-\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_2,\alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\big)\Big\},$$

gdzie N'_{B_1} wynosi:

$$N'_{B_1}=\tfrac{1}{16}e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2\left(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22}\right)^2} \tag{592}$$
$$\times\Big\{4+8e^{\frac{1}{4}\eta_2^2\left(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22}\right)^2}-3\eta_2^2\big(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22}\big)^2\Big\}.$$

Rodzina funcji kwadrupolowych otrzymanych z rzutu $u_0\big(\eta_2, \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20}\big)u_1(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22}\big)$:

(a) na reprezentację A_1:

$$\psi^{A_1}_{vib2}(\alpha_{20}, \alpha_{22}) = \tag{593}$$
$$\sqrt{\tfrac{1}{N''_{A_1}}}\Big\{\tfrac{1}{2}u_0\big(\eta_2, \alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22}\big) +$$
$$\tfrac{\sqrt{3}}{4}u_1\big(\eta_2, \alpha_{20}-\tfrac{1}{2}(-\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\big)+$$
$$\tfrac{1}{4}u_0\big(\eta_2, \alpha_{20}-\tfrac{1}{2}(-\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\big)\Big\},$$

gdzie N''_{A_1} wynosi:

$$N''_{A_1} = \tfrac{1}{16}e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2\left(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22}\right)^2} \tag{594}$$
$$\times\Big\{4 + 8e^{\frac{1}{4}\eta_2^2\left(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22}\right)^2} + \eta_2^2\big(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20} - \sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22}\big)^2\Big\},$$

(b) na reprezentację B_1:

$$\psi^{B_1}_{vib2}(\alpha_{20}, \alpha_{22}) = \tag{595}$$
$$\sqrt{\tfrac{1}{N''_{A_1}}}\Big\{\tfrac{1}{2}u_0\big(\eta_2, \alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22}\big)-$$
$$\tfrac{\sqrt{3}}{4}u_1\big(\eta_2, \alpha_{20}-\tfrac{1}{2}(-\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\big) -$$
$$\tfrac{1}{4}u_0\big(\eta_2, \alpha_{20}-\tfrac{1}{2}(-\mathring{\alpha}_{20}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{22})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_2, \alpha_{22}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{20}+2\mathring{\alpha}_{22})\big)\Big\},$$

gdzie N''_{B_1} wynosi:

$$N''_{B_1} = \tfrac{1}{16}e^{-\frac{1}{4}\eta_2^2\left(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22}\right)^2} \tag{596}$$
$$\times\Big\{ - 4 + 8e^{\frac{1}{4}\eta_2^2\left(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20}-\sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22}\right)^2} - \eta_2^2\big(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{20} - \sqrt{2}\mathring{\alpha}_{22}\big)^2\Big\}.$$

C.2 Funkcje oktupolowe

Funkcje opisujące oktupolową część wibracyjną otrzymane są z czterech funkcji początkowych.

Rodzina funcji oktupolowych otrzymanych z rzutu

$u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big)u_0(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big)$:

na reprezentację $\mathbf{A_1}$:

$$\psi^{(+);A_1}_{vib3}(\alpha_{3\mu}) = \sqrt{\frac{1}{N_{A_1}}}\frac{1}{16\sqrt{2}}$$
$$\times\Big\{2\sqrt{2}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+2\sqrt{2}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$-2\sqrt{2}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$-2\sqrt{2}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},$$

gdzie N_{A_1} wynosi:

$$N_{A_1} = \frac{1}{64} e^{-3\eta_3^2 \mathring{\beta}_3^2} \Big\{ 8 e^{\eta_3^2 \left(3\mathring{\alpha}_{30}^2 + 4\mathring{\alpha}_{31}'^{\,2} + 6\mathring{\alpha}_{32}'^{\,2} + 4\mathring{\alpha}_{33}'^{\,2}\right)} + 8 e^{3\eta_3^2 \mathring{\beta}_3^2}$$
$$+ \big(4\mathring{\alpha}_{30}^2 - 4\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}_{31}' + 3\mathring{\alpha}_{31}'^{\,2} + 4\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}_{33}' - 2\sqrt{15}\mathring{\alpha}_{31}'\mathring{\alpha}_{33}' + 5\mathring{\alpha}_{33}'^{\,2}\big)\eta_3^2 \times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2 \left(5\mathring{\beta}_3^2 + \sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}_{31}' - \sqrt{10}\mathring{\alpha}_{31}'\mathring{\alpha}_{32}' - \sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}_{33}' - \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{32}'\mathring{\alpha}_{33}'\right)}$$
$$+ \big(4\mathring{\alpha}_{30}^2 + 4\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}_{31}' + 3\mathring{\alpha}_{31}'^{\,2} - 4\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}_{33}' - 2\sqrt{15}\mathring{\alpha}_{31}'\mathring{\alpha}_{33}' + 5\mathring{\alpha}_{33}'^{\,2}\big)\eta_3^2 \times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2 \left(5\mathring{\beta}_3^2 - \sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}_{31}' + \sqrt{10}\mathring{\alpha}_{31}'\mathring{\alpha}_{32}' + \sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}_{33}' + \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{32}'\mathring{\alpha}_{33}'\right)}$$
$$+ 2\big(4\mathring{\alpha}_{30}^2 - 3\mathring{\alpha}_{31}'^{\,2} + 2\sqrt{15}\mathring{\alpha}_{31}'\mathring{\alpha}_{33}' - 5\mathring{\alpha}_{33}'^{\,2}\big)\eta_3^2 e^{\frac{5}{2}\eta_3^2 \mathring{\beta}_3^2}$$
$$+ 8\big(2\mathring{\alpha}_{30}^2\eta_3^2 - 1\big) e^{2\eta_3^2 \mathring{\beta}_3^2} \Big(1 + e^{2\eta_3^2 \left(\mathring{\alpha}_{31}'^{\,2} + \mathring{\alpha}_{33}'^{\,2}\right)}\Big) \Big\} \tag{597}$$

oraz

$$\mathring{\beta}_3^2 = \mathring{\alpha}_{30}^2 + 2\big(\mathring{\alpha}_{31}'^{\,2} + \mathring{\alpha}_{32}'^{\,2} + \mathring{\alpha}_{33}'^{\,2}\big),$$

na reprezentację $\mathbf{B_1}$:

$$\psi_{vib3}^{(+);B_1}(\alpha_{3\mu}) = \sqrt{\frac{1}{N_{B_1}}} \frac{1}{16\sqrt{2}} \times$$
$$\Big\{ 2\sqrt{2} u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{31}' + \mathring{\alpha}_{31}'\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{32}' - \mathring{\alpha}_{32}'\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{33}' + \mathring{\alpha}_{33}'\big)$$
$$+ 2\sqrt{2} u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{31}' - \mathring{\alpha}_{31}'\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{32}' - \mathring{\alpha}_{32}'\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{33}' - \mathring{\alpha}_{33}'\big)$$
$$- 2\sqrt{2} u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{31}' - \mathring{\alpha}_{31}'\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{32}' + \mathring{\alpha}_{32}'\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{33}' - \mathring{\alpha}_{33}'\big)$$
$$- 2\sqrt{2} u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{31}' + \mathring{\alpha}_{31}'\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{32}' + \mathring{\alpha}_{32}'\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{33}' + \mathring{\alpha}_{33}'\big)$$
$$- \sqrt{3} u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{31}' + \sqrt{5}\mathring{\alpha}_{33}')\big) u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{31}' - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}_{32}')\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{32}' - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}_{31}' + \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{33}')\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{33}' - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{32}')\big)$$
$$+ \sqrt{5} u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{31}' + \sqrt{5}\mathring{\alpha}_{33}')\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{31}' - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}_{32}')\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{32}' - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}_{31}' + \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{33}')\big) u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{33}' - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{32}')\big)$$
$$- \sqrt{3} u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{31}' - \sqrt{5}\mathring{\alpha}_{33}')\big) u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{31}' - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}_{32}')\big)$$

$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},$$

gdzie N_{B_1} wynosi:

$$N_{B_1}=\tfrac{1}{64}e^{-3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big\{8e^{\eta_3^2\left(3\mathring{\alpha}_{30}^2+4\mathring{\alpha}_{31}'^2+6\mathring{\alpha}_{32}'^2+4\mathring{\alpha}_{33}'^2\right)}+8e^{3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}$$
$$-\big(4\mathring{\alpha}_{30}^2-4\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+3\mathring{\alpha}_{31}'^2+4\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}-2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33}+5\mathring{\alpha}_{33}'^2\big)\eta_3^2\times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2+\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}$$
$$-\big(4\mathring{\alpha}_{30}^2+4\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+3\mathring{\alpha}_{31}'^2-4\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}-2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33}+5\mathring{\alpha}_{33}'^2\big)\eta_3^2\times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2-\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}$$
$$-2\big(4\mathring{\alpha}_{30}^2-3\mathring{\alpha}_{31}'^2+2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33}-5\mathring{\alpha}_{33}'^2\big)\eta_3^2e^{\frac{5}{2}\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}$$
$$+8\big(2\mathring{\alpha}_{30}^2\eta_3^2-1\big)e^{2\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big(1+e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}_{31}'^2+\mathring{\alpha}_{33}'^2\right)}\Big)\Big\},\qquad(598)$$

na reprezentację $\mathbf{A_2}$:

$$\psi_{vib3}^{(+);A_2}(\alpha_{3\mu})=\sqrt{\tfrac{1}{N_{A_2}}}\tfrac{1}{16\sqrt{2}}\times$$
$$\Big\{-2\sqrt{2}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+2\sqrt{2}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+2\sqrt{2}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$

$$
\begin{gathered}
-2\sqrt{2}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},
\end{gathered}
$$

gdzie N_{A_2} wynosi:

$$
\begin{gathered}
N_{A_2}=\tfrac{1}{64}e^{-3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big\{-8e^{\eta_3^2\left(3\mathring{\alpha}_{30}^2+4\mathring{\alpha}_{31}'^2+6\mathring{\alpha}_{32}'^2+4\mathring{\alpha}_{33}'^2\right)}+8e^{3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2} \\
-\big(4\mathring{\alpha}_{30}^2-4\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+3\mathring{\alpha}_{31}'^2+4\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}-2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33}+5\mathring{\alpha}_{33}'^2\big)\eta_3^2\times \\
e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2+\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)} \\
-\big(4\mathring{\alpha}_{30}^2+4\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+3\mathring{\alpha}_{31}'^2-4\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}-2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33}+5\mathring{\alpha}_{33}'^2\big)\eta_3^2\times \\
e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2-\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)} \\
+2\big(4\mathring{\alpha}_{30}^2-3\mathring{\alpha}_{31}'^2+2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33}-5\mathring{\alpha}_{33}'^2\big)\eta_3^2e^{\frac{5}{2}\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2} \\
+8\big(2\mathring{\alpha}_{30}^2\eta_3^2-1\big)e^{2\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\left(1-e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}_{31}'^2+\mathring{\alpha}_{33}'^2\right)}\right)\Big\},
\end{gathered}
\tag{599}
$$

na reprezentację $\mathbf{B_2}$:

$$\psi_{vib3}^{(+);B_2}(\alpha_{3\mu}) = \sqrt{\frac{1}{N_{B_2}}\frac{1}{16\sqrt{2}}} \times$$
$$\Big\{ -2\sqrt{2}u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+2\sqrt{2}u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+2\sqrt{2}u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$-2\sqrt{2}u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},$$

gdzie N_{B_2} wynosi:

$$
\begin{aligned}
N_{B_2} = \tfrac{1}{64} e^{-3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2} \Big\{ - 8 e^{\eta_3^2\left(3\mathring{\alpha}_{30}^2+4\mathring{\alpha}_{31}^{\prime\,2}+6\mathring{\alpha}_{32}^{\prime\,2}+4\mathring{\alpha}_{33}^{\prime\,2}\right)} + 8 e^{3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2} \\
+\big(4\mathring{\alpha}_{30}^2 - 4\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31} + 3\mathring{\alpha}_{31}^{\prime\,2} + 4\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33} - 2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33} + 5\mathring{\alpha}_{33}^{\prime\,2}\big)\eta_3^2 \times \\
e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2+\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)} \\
+\big(4\mathring{\alpha}_{30}^2 + 4\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31} + 3\mathring{\alpha}_{31}^{\prime\,2} - 4\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33} - 2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33} + 5\mathring{\alpha}_{33}^{\prime\,2}\big)\eta_3^2 \times \\
e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2-\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)} \\
-2\big(4\mathring{\alpha}_{30}^2 - 3\mathring{\alpha}_{31}^{\prime\,2} + 2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33} - 5\mathring{\alpha}_{33}^{\prime\,2}\big)\eta_3^2 e^{\frac{5}{2}\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2} \\
+8\big(2\mathring{\alpha}_{30}^2\eta_3^2 - 1\big) e^{2\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big(1 - e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}_{31}^{\prime\,2}+\mathring{\alpha}_{33}^{\prime\,2}\right)}\Big)\Big\},
\end{aligned}
\tag{600}
$$

na reprezentację **E**:

Pierwszy wektor bazowy ma postać:

$$
\begin{aligned}
\psi_{vib3;1}^{(-);E}(\alpha_{3\mu}) = \sqrt{\tfrac{1}{N_{E1}}\tfrac{1}{4}} \times \\
\Big\{ - u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \mathring{\alpha}'_{31}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
+u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
-u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
+u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \mathring{\alpha}'_{31}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \mathring{\alpha}'_{33}\big)\Big\},
\end{aligned}
$$

gdzie N_{E1} wynosi:

$$
N_{E1} = \tfrac{1}{4} e^{-\eta_3^3\mathring{\beta}_3^2}\Big(e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}_{31}^{\prime\,2}+\mathring{\alpha}_{33}^{\prime\,2}\right)} - 1\Big)\Big(e^{\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}_{30}^2+2\mathring{\alpha}_{32}^{\prime\,2}\right)} + 2\mathring{\alpha}_{30}^2\eta_3^2 - 1\Big).
\tag{601}
$$

Drugi wetor bazowy ma postać:

$$\psi^{(-);E}_{vib3;2}(\alpha_{3\mu}) = \sqrt{\tfrac{1}{N_{E2}}}\tfrac{1}{8\sqrt{2}} \times$$

$$\Big\{-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},$$

gdzie N_{E_2} wynosi:

$$N_{E2} = \tfrac{1}{4}e^{-\eta_3^3\mathring{\beta}_3^2}\Big(e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}'^{2}_{31}+\mathring{\alpha}'^{2}_{33}\right)}-1\Big)\Big(e^{\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}_{30}^2+2\mathring{\alpha}'^{2}_{32}\right)}+2\mathring{\alpha}_{30}^2\eta_3^2-1\Big). \tag{602}$$

Rodzina funcji oktupolowych otrzymanych z rzutu

$u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30})u_1(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)u_0(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)$:

na reprezentację $\mathbf{A_1}$:

$$
\begin{gathered}
\psi^{(+);A_1}_{vib3}(\alpha_{3\mu})=\sqrt{\tfrac{1}{N'_{A_1}}}\tfrac{1}{16\sqrt{2}}\times\\
\Big\{-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)\\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big)\\
+2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)\\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)\\
+2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big)\\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)\\
-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big)\\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big)\\
-\sqrt{3}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
+\sqrt{3}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
-\sqrt{3}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
+\sqrt{3}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},
\end{gathered}
$$

gdzie N'_{A_1} wynosi:

$$
\begin{aligned}
N'_{A_1} = \tfrac{1}{128} e^{-3\eta_3^2 \mathring{\beta}_3^2} \Big\{ 16 e^{2\eta_3^2 \left(\mathring{\beta}_3^2 + \mathring{\alpha}'^{\,2}_{31} + \mathring{\alpha}'^{\,2}_{33}\right)} + 16 e^{3\eta_3^2 \mathring{\beta}_3^2} \\
+ \big(3\mathring{\alpha}_{30}^2 - 8\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31} + 16\mathring{\alpha}'^{\,2}_{31} - 2\sqrt{30}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{32} + 8\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32} + 10\mathring{\alpha}'^{\,2}_{32}\big)\eta_3^2 \times \\
e^{\frac{1}{2}\eta_3^2 \left(5\mathring{\beta}_3^2 + \sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)} \\
+ \big(3\mathring{\alpha}_{30}^2 + 8\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31} + 16\mathring{\alpha}'^{\,2}_{31} - 2\sqrt{30}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{32} - 8\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32} + 10\mathring{\alpha}'^{\,2}_{32}\big)\eta_3^2 \times \\
e^{\frac{1}{2}\eta_3^2 \left(5\mathring{\beta}_3^2 - \sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)} \\
-2\big(3\mathring{\alpha}_{30}^2 - 16\mathring{\alpha}'^{\,2}_{31} - 2\sqrt{30}\mathring{\alpha}'_{30}\mathring{\alpha}'_{32} + 10\mathring{\alpha}'^{\,2}_{32}\big)\eta_3^2 e^{\frac{5}{2}\eta_3^2 \mathring{\beta}_3^2} \\
+16\big(4\mathring{\alpha}'^{\,2}_{31}\eta_3^2 - 1\big) e^{2\eta_3^2 \mathring{\beta}_3^2} \Big(1 + e^{\eta_3^2 \left(\mathring{\alpha}_{30}^2 + 2\mathring{\alpha}'^{\,2}_{32}\right)}\Big) \Big\},
\end{aligned}
\tag{603}
$$

na reprezentację $\mathbf{B_1}$:

$$
\begin{aligned}
\psi^{(+);B_1}_{vib3}(\alpha_{3\mu}) = \sqrt{\tfrac{1}{N'_{B_1}}} \tfrac{1}{16\sqrt{2}} \times \\
\Big\{ -2\sqrt{2} u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big) u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \mathring{\alpha}'_{31}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
+2\sqrt{2} u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big) u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
+2\sqrt{2} u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big) u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
-2\sqrt{2} u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big) u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \mathring{\alpha}'_{31}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
+\sqrt{3} u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{5} u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{3} u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{5} u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{3} u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)
\end{aligned}
$$

$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{3}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},$$

gdzie N'_{B_1} wynosi:

$$N'_{B_1}=\tfrac{1}{128}e^{-3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big\{16e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\beta}_3^2+\mathring{\alpha}_{31}'^2+\mathring{\alpha}_{33}'^2\right)}+16e^{3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}$$
$$-\big(3\mathring{\alpha}_{30}^2-8\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+16\mathring{\alpha}_{31}'^2-2\sqrt{30}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{32}+8\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+10\mathring{\alpha}_{32}'^2\big)\eta_3^2\times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2+\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}$$
$$-\big(3\mathring{\alpha}_{30}^2+8\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+16\mathring{\alpha}_{31}'^2-2\sqrt{30}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{32}-8\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+10\mathring{\alpha}_{32}'^2\big)\eta_3^2\times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2-\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}$$
$$+2\big(3\mathring{\alpha}_{30}^2-16\mathring{\alpha}_{31}'^2-2\sqrt{30}\mathring{\alpha}'_{30}\mathring{\alpha}'_{32}+10\mathring{\alpha}_{32}'^2\big)\eta_3^2e^{\frac{5}{2}\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}$$
$$+16\big(4\mathring{\alpha}_{31}'^2\eta_3^2-1\big)e^{2\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big(1+e^{\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}_{30}^2+2\mathring{\alpha}_{32}'^2\right)}\Big)\Big\},\qquad(604)$$

na reprezentację $\mathbf{A_2}$:

$$\psi_{vib3}^{(+);A_2}(\alpha_{3\mu})=\sqrt{\tfrac{1}{N'_{A_2}}\tfrac{1}{16\sqrt{2}}}\times$$
$$\Big\{2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$-\sqrt{3}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$

$$+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{3}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{3}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{3}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},$$

gdzie N'_{A_2} wynosi:

$$N'_{A_2}=\tfrac{1}{128}e^{-3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big\{-16e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\beta}_3^2+\mathring{\alpha}'^2_{31}+\mathring{\alpha}'^2_{33}\right)}+16e^{3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}$$
$$-\big(3\mathring{\alpha}_{30}^2-8\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+16\mathring{\alpha}'^2_{31}-2\sqrt{30}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{32}+8\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+10\mathring{\alpha}'^2_{32}\big)\eta_3^2\times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2+\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}$$
$$-\big(3\mathring{\alpha}_{30}^2+8\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+16\mathring{\alpha}'^2_{31}-2\sqrt{30}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{32}-8\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+10\mathring{\alpha}'^2_{32}\big)\eta_3^2\times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2-\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}$$
$$-2\big(3\mathring{\alpha}_{30}^2-16\mathring{\alpha}'^2_{31}-2\sqrt{30}\mathring{\alpha}'_{30}\mathring{\alpha}'_{32}+10\mathring{\alpha}'^2_{32}\big)\eta_3^2e^{\frac{5}{2}\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}$$
$$+16\big(4\mathring{\alpha}'^2_{31}\eta_3^2-1\big)e^{2\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big(1-e^{\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}_{30}^2+2\mathring{\alpha}'^2_{32}\right)}\Big)\Big\},\qquad(605)$$

na reprezentację $\mathbf{B_2}$:

$$\psi^{(+);B_2}_{vib3}(\alpha_{3\mu})=\sqrt{\tfrac{1}{N'_{B_2}}}\tfrac{1}{16\sqrt{2}}\times$$
$$\Big\{2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$

$$+2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+\sqrt{3}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{3}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{3}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{3}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},$$

gdzie N'_{B_2} wynosi:

$$N'_{B_2}=\tfrac{1}{128}e^{-3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big\{-16e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\beta}_3^2+\mathring{\alpha}_{31}^{\prime\,2}+\mathring{\alpha}_{33}^{\prime\,2}\right)}+16e^{3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}$$
$$+\big(3\mathring{\alpha}_{30}^2-8\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+16\mathring{\alpha}_{31}^{\prime\,2}-2\sqrt{30}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{32}+8\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+10\mathring{\alpha}_{32}^{\prime\,2}\big)\eta_3^2\times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2+\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}$$
$$+\big(3\mathring{\alpha}_{30}^2+8\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+16\mathring{\alpha}_{31}^{\prime\,2}-2\sqrt{30}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{32}-8\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+10\mathring{\alpha}_{32}^{\prime\,2}\big)\eta_3^2\times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2-\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}$$
$$+2\big(3\mathring{\alpha}_{30}^2-16\mathring{\alpha}_{31}^{\prime\,2}-2\sqrt{30}\mathring{\alpha}'_{30}\mathring{\alpha}'_{32}+10\mathring{\alpha}_{32}^{\prime\,2}\big)\eta_3^2e^{\frac{5}{2}\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}$$

$$+16\big(4\mathring{\alpha}'^{2}_{31}\eta_3^2-1\big)e^{2\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big(1-e^{\eta_3^2\big(\mathring{\alpha}_{30}^2+2\mathring{\alpha}'^{2}_{32}\big)}\Big)\Big\}, \tag{606}$$

na reprezentację **E**:
Pierwszy wektor bazowy:

$$\psi^{(-);E}_{vib3;1}(\alpha_{3\mu})=\sqrt{\tfrac{1}{N'_{E1}}}\tfrac{1}{4}\times$$
$$\Big\{u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big)\Big\},$$

gdzie N'_{E1} wynosi:

$$N'_{E1}=\tfrac{1}{4}e^{-\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big(e^{\eta_3^2\big(\mathring{\alpha}_{30}^2+2\mathring{\alpha}'^{2}_{32}\big)}+1\Big)\Big(e^{2\eta_3^2\big(\mathring{\alpha}'^{2}_{31}+\mathring{\alpha}'^{2}_{33}\big)}-4\mathring{\alpha}'^{2}_{31}\eta_3^2+1\Big). \tag{607}$$

Drugi wektor bazowy:

$$\psi^{(-);E}_{vib3;2}(\alpha_{3\mu})=\sqrt{\tfrac{1}{N'_{E2}}}\tfrac{1}{8\sqrt{2}}\times$$
$$\Big\{\sqrt{3}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{3}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$

$$+\sqrt{3}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{3}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},$$

gdzie N'_{E_2} wynosi:

$$N'_{E2}=\tfrac{1}{4}e^{-\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big(e^{\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}_{30}^2+2\mathring{\alpha}'^2_{32}\right)}+1\Big)\Big(e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}'^2_{31}+\mathring{\alpha}'^2_{33}\right)}-4\mathring{\alpha}'^2_{31}\eta_3^2+1\Big). \tag{608}$$

Rodzina funcji oktupolowych otrzymanych z rzutu

$u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)$:

na reprezentację $\mathbf{A_1}$:

$$\psi^{(+);A_1}_{vib3}(\alpha_{3\mu})=\sqrt{\tfrac{1}{N''_{A_1}}}\tfrac{1}{16\sqrt{2}}\times$$
$$\Big\{2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$

$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},$$

gdzie N''_{A_1} wynosi:

$$N''_{A_1}=\tfrac{1}{64}e^{-3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big\{8e^{\eta_3^2\left(3\mathring{\alpha}_{30}^2+4\mathring{\alpha}'^{2}_{31}+6\mathring{\alpha}'^{2}_{32}+4\mathring{\alpha}'^{2}_{33}\right)}+8e^{3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}$$
$$+\big(5\mathring{\alpha}'^{2}_{31}+4\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+8\mathring{\alpha}'^{2}_{32}+2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33}+4\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}+3\mathring{\alpha}'^{2}_{33}\big)\eta_3^2\times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2+\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}$$
$$+\big(5\mathring{\alpha}'^{2}_{31}-4\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+8\mathring{\alpha}'^{2}_{32}+2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33}-4\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}+3\mathring{\alpha}'^{2}_{33}\big)\eta_3^2\times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2-\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}$$
$$-2\big(5\mathring{\alpha}'^{2}_{31}-8\mathring{\alpha}'^{2}_{32}+2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33}+3\mathring{\alpha}'^{2}_{33}\big)\eta_3^2e^{\frac{5}{2}\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}$$
$$+8\big(4\mathring{\alpha}'^{2}_{32}\eta_3^2-1\big)e^{2\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\left(1+e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}'^{2}_{31}+\mathring{\alpha}'^{2}_{33}\right)}\right)\Big\}, \tag{609}$$

na reprezentację $\mathbf{B_1}$:

$$\psi^{(+);B_1}_{vib3}(\alpha_{3\mu})=\sqrt{\tfrac{1}{N''_{B_1}}}\tfrac{1}{16\sqrt{2}}\times$$
$$\Big\{2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)$$

$$
\begin{gathered}
-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},
\end{gathered}
$$

gdzie N''_{B_1} wynosi:

$$
\begin{gathered}
N''_{B_1} = \tfrac{1}{64}e^{-3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big\{8e^{\eta_3^2\left(3\mathring{\alpha}_{30}^2+4\mathring{\alpha}'^2_{31}+6\mathring{\alpha}'^2_{32}+4\mathring{\alpha}'^2_{33}\right)} + 8e^{3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2} \\
-\big(5\mathring{\alpha}'^2_{31} + 4\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32} + 8\mathring{\alpha}'^2_{32} + 2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33} + 4\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33} + 3\mathring{\alpha}'^2_{33}\big)\eta_3^2 \times \\
e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2+\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)} \\
-\big(5\mathring{\alpha}'^2_{31} - 4\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32} + 8\mathring{\alpha}'^2_{32} + 2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33} - 4\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33} + 3\mathring{\alpha}'^2_{33}\big)\eta_3^2 \times \\
e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2-\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)} \\
+2\big(5\mathring{\alpha}'^2_{31} - 8\mathring{\alpha}'^2_{32} + 2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33} + 3\mathring{\alpha}'^2_{33}\big)\eta_3^2 e^{\frac{5}{2}\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2} \\
+8\big(4\mathring{\alpha}'^2_{32}\eta_3^2 - 1\big)e^{2\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big(1 + e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}'^2_{31}+\mathring{\alpha}'^2_{33}\right)}\Big)\Big\}, \qquad (610)
\end{gathered}
$$

na reprezentację $\mathbf{A_2}$:

$$
\begin{aligned}
\psi^{(+);A_2}_{vib3}(\alpha_{3\mu}) = \sqrt{\tfrac{1}{N''_{A_2}}}\tfrac{1}{16\sqrt{2}} \times \\
\Big\{ -2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
+2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
+2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},
\end{aligned}
$$

gdzie N''_{A_2} wynosi:

$$N''_{A_2} = \tfrac{1}{64}e^{-3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big\{ - 8e^{\eta_3^2\left(3\mathring{\alpha}_{30}^2+4\mathring{\alpha}_{31}'^{\,2}+6\mathring{\alpha}_{32}'^{\,2}+4\mathring{\alpha}_{33}'^{\,2}\right)} + 8e^{3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}$$
$$-\big(5\mathring{\alpha}_{31}'^{\,2} + 4\sqrt{10}\mathring{\alpha}_{31}'\mathring{\alpha}_{32}' + 8\mathring{\alpha}_{32}'^{\,2} + 2\sqrt{15}\mathring{\alpha}_{31}'\mathring{\alpha}_{33}' + 4\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{32}'\mathring{\alpha}_{33}' + 3\mathring{\alpha}_{33}'^{\,2}\big)\eta_3^2 \times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2+\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}_{31}'-\sqrt{10}\mathring{\alpha}_{31}'\mathring{\alpha}_{32}'-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}_{33}'-\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{32}'\mathring{\alpha}_{33}'\right)}$$

$$-\big(5\mathring{\alpha}_{31}'^{\,2} - 4\sqrt{10}\mathring{\alpha}_{31}'\mathring{\alpha}_{32}' + 8\mathring{\alpha}_{32}'^{\,2} + 2\sqrt{15}\mathring{\alpha}_{31}'\mathring{\alpha}_{33}' - 4\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{32}'\mathring{\alpha}_{33}' + 3\mathring{\alpha}_{33}'^{\,2}\big)\eta_3^2 \times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2-\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}_{31}'+\sqrt{10}\mathring{\alpha}_{31}'\mathring{\alpha}_{32}'+\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}_{33}'+\sqrt{6}\mathring{\alpha}_{32}'\mathring{\alpha}_{33}'\right)}$$
$$-2\big(5\mathring{\alpha}_{31}'^{\,2} - 8\mathring{\alpha}_{32}'^{\,2} + 2\sqrt{15}\mathring{\alpha}_{31}'\mathring{\alpha}_{33}' + 3\mathring{\alpha}_{33}'^{\,2}\big)\eta_3^2 e^{\frac{5}{2}\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}$$
$$+8\big(4\mathring{\alpha}_{32}'^{\,2}\eta_3^2 - 1\big)e^{2\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big(1 - e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}_{31}'^{\,2}+\mathring{\alpha}_{33}'^{\,2}\right)}\Big)\Big\}, \tag{611}$$

na reprezentację $\mathbf{B_2}$:

$$\psi_{vib3}^{(+);B_2}(\alpha_{3\mu}) = \sqrt{\tfrac{1}{N''_{B_2}}\tfrac{1}{16\sqrt{2}}} \times$$
$$\Big\{ - 2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{31}' + \mathring{\alpha}_{31}'\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{32}' - \mathring{\alpha}_{32}'\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{33}' + \mathring{\alpha}_{33}'\big)$$
$$+2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{31}' - \mathring{\alpha}_{31}'\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{32}' - \mathring{\alpha}_{32}'\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{33}' - \mathring{\alpha}_{33}'\big)$$
$$+2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{31}' - \mathring{\alpha}_{31}'\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{32}' + \mathring{\alpha}_{32}'\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{33}' - \mathring{\alpha}_{33}'\big)$$
$$-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{31}' + \mathring{\alpha}_{31}'\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{32}' + \mathring{\alpha}_{32}'\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{33}' + \mathring{\alpha}_{33}'\big)$$
$$+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{31}' + \sqrt{5}\mathring{\alpha}_{33}')\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{31}' - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}_{32}')\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{32}' - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}_{31}' + \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{33}')\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{33}' - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{32}')\big)$$
$$+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{31}' + \sqrt{5}\mathring{\alpha}_{33}')\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{31}' - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}_{32}')\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{32}' - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}_{31}' + \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{33}')\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{33}' - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{32}')\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{31}' - \sqrt{5}\mathring{\alpha}_{33}')\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{31}' - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}_{32}')\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{32}' - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}_{31}' - \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{33}')\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{33}' - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{32}')\big)$$
$$-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{31}' - \sqrt{5}\mathring{\alpha}_{33}')\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{31}' - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}_{32}')\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{32}' - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}_{31}' - \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{33}')\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha_{33}' - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}_{32}')\big)$$

$$
\begin{aligned}
&+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},
\end{aligned}
$$

gdzie N''_{B_2} wynosi:

$$
\begin{aligned}
N''_{B_2} = {}&\tfrac{1}{64}e^{-3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big\{-8e^{\eta_3^2\left(3\mathring{\alpha}_{30}^2+4\mathring{\alpha}'^2_{31}+6\mathring{\alpha}'^2_{32}+4\mathring{\alpha}'^2_{33}\right)}+8e^{3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\\
&+\big(5\mathring{\alpha}'^2_{31}+4\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+8\mathring{\alpha}'^2_{32}+2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33}+4\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}+3\mathring{\alpha}'^2_{33}\big)\eta_3^2\times\\
&e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2+\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}\\
&+\big(5\mathring{\alpha}'^2_{31}-4\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+8\mathring{\alpha}'^2_{32}+2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33}-4\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}+3\mathring{\alpha}'^2_{33}\big)\eta_3^2\times\\
&e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2-\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}\\
&+2\big(5\mathring{\alpha}'^2_{31}-8\mathring{\alpha}'^2_{32}+2\sqrt{15}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{33}+3\mathring{\alpha}'^2_{33}\big)\eta_3^2e^{\frac{5}{2}\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\\
&+8\big(4\mathring{\alpha}'^2_{32}\eta_3^2-1\big)e^{2\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big(1-e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}'^2_{31}+\mathring{\alpha}'^2_{33}\right)}\Big)\Big\},
\end{aligned}
\tag{612}
$$

na reprezentację **E**:
Pierwszy wektor bazowy:

$$
\begin{aligned}
\psi^{(-);E}_{vib3;1}(\alpha_{3\mu}) = {}&\sqrt{\tfrac{1}{N''_{E1}}}\tfrac{1}{4}\times\\
\Big\{&-u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)\\
&\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big)\\
&+u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)\\
&\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)\\
&-u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big)\\
&\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)\\
&+u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big)\\
&\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big)\Big\},
\end{aligned}
$$

gdzie N''_{E1} wynosi:

$$N''_{E_1} = \tfrac{1}{4}e^{-\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big\{e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}'^{\,2}_{31}+\mathring{\alpha}'^{\,2}_{33}\right)} - 1\Big\}\Big\{e^{\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}^2_{30}+2\mathring{\alpha}'^{\,2}_{32}\right)} + 4\mathring{\alpha}'^{\,2}_{32}\eta_3^2 - 1\Big\}. \tag{613}$$

Drugi wektor bazowy:

$$\psi^{(+);E}_{vib3;2}(\alpha_{3\mu}) = \sqrt{\tfrac{1}{N''_{E2}}\tfrac{1}{8\sqrt{2}}} \times$$
$$\Big\{\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{5}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},$$

gdzie N''_{E2} wynosi:

$$N''_{E2} = \tfrac{1}{4}e^{-\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big\{e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}'^{\,2}_{31}+\mathring{\alpha}'^{\,2}_{33}\right)} - 1\Big\}\Big\{e^{\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}^2_{30}+2\mathring{\alpha}'^{\,2}_{32}\right)} + 4\mathring{\alpha}'^{\,2}_{32}\eta_3^2 - 1\Big\}. \tag{614}$$

Rodzina funcji oktupolowych otrzymanych z rzutu

$u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big)u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big)$:

na reprezentację $\mathbf{A_1}$:

$$
\begin{gathered}
\psi^{(+);A_1}_{vib3}(\alpha_{3\mu}) = \sqrt{\tfrac{1}{N'''_{A_1}}}\tfrac{1}{16\sqrt{2}}\times \\
\Big\{-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
+2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
+2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
+\sqrt{5}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{5}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{5}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{5}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},
\end{gathered}
$$

gdzie N'''_{A_1} wynosi:

$$N'''_{A_1} = \frac{1}{128} e^{-3\eta_3^2 \mathring{\beta}_3^2} \Big\{ 16 e^{2\eta_3^2 \left(\mathring{\beta}_3^2 + \mathring{\alpha}'^2_{31} + \mathring{\alpha}'^2_{33}\right)} + 16 e^{3\eta_3^2 \mathring{\beta}_3^2}$$
$$+\left(5\mathring{\alpha}_{30}^2 + 2\sqrt{30}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{32} + 6\mathring{\alpha}'^2_{32} + 8\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33} + 8\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33} + 16\mathring{\alpha}'^2_{33}\right)\eta_3^2 \times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2 + \sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}$$

$$+\left(5\mathring{\alpha}_{30}^2 + 2\sqrt{30}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{32} + 6\mathring{\alpha}'^2_{32} - 8\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33} - 8\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33} + 16\mathring{\alpha}'^2_{33}\right)\eta_3^2 \times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2 - \sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}$$
$$-2\left(5\mathring{\alpha}_{30}^2 + 6\mathring{\alpha}'^2_{32} + 2\sqrt{30}\mathring{\alpha}'_{30}\mathring{\alpha}'_{32} - 16\mathring{\alpha}'^2_{33}\right)\eta_3^2 e^{\frac{5}{2}\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}$$
$$+16\left(4\mathring{\alpha}'^2_{33}\eta_3^2 - 1\right)e^{2\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\left(1 + e^{\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}_{30}^2 + 2\mathring{\alpha}'^2_{32}\right)}\right)\Big\}, \quad (615)$$

na reprezentację $\mathbf{B_1}$:

$$\psi_{vib3}^{(+);B_1}(\alpha_{3\mu}) = \sqrt{\frac{1}{N'''_{B_1}}}\frac{1}{16\sqrt{2}} \times$$
$$\Big\{ -2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$-\sqrt{5}u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{5}u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$

$$
\begin{aligned}
&-\sqrt{5}u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&+\sqrt{5}u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},
\end{aligned}
$$

gdzie N'''_{B_1} wynosi:

$$
\begin{aligned}
N'''_{B_1} &= \tfrac{1}{128}e^{-3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big\{16e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\beta}_3^2+\mathring{\alpha}'^{\,2}_{31}+\mathring{\alpha}'^{\,2}_{33}\right)} + 16e^{3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\\
&-\big(5\mathring{\alpha}_{30}^2 + 2\sqrt{30}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{32} + 6\mathring{\alpha}'^{\,2}_{32} + 8\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33} + 8\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33} + 16\mathring{\alpha}'^{\,2}_{33}\big)\eta_3^2 \times\\
&\quad e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2+\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}\\
&-\big(5\mathring{\alpha}_{30}^2 + 2\sqrt{30}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{32} + 6\mathring{\alpha}'^{\,2}_{32} - 8\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33} - 8\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33} + 16\mathring{\alpha}'^{\,2}_{33}\big)\eta_3^2 \times\\
&\quad e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2-\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}\\
&+2\big(5\mathring{\alpha}_{30}^2 + 6\mathring{\alpha}'^{\,2}_{32} + 2\sqrt{30}\mathring{\alpha}'_{30}\mathring{\alpha}'_{32} - 16\mathring{\alpha}'^{\,2}_{33}\big)\eta_3^2 e^{\frac{5}{2}\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\\
&+16\big(4\mathring{\alpha}'^{\,2}_{33}\eta_3^2 - 1\big)e^{2\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big(1 + e^{\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}_{30}^2+2\mathring{\alpha}'^{\,2}_{32}\right)}\Big)\Big\},
\end{aligned}
\tag{616}
$$

na reprezentację $\mathbf{A_2}$:

$$
\begin{aligned}
\psi^{(+);A_2}_{vib3}(\alpha_{3\mu}) &= \sqrt{\tfrac{1}{N'''_{A_2}}}\tfrac{1}{16\sqrt{2}} \times\\
\Big\{&2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big)\\
&\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \mathring{\alpha}'_{33}\big)\\
&+2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big)\\
&\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big)\\
&-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \mathring{\alpha}'_{32}\big)\\
&\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big)\\
&-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \mathring{\alpha}'_{32}\big)\\
&\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \mathring{\alpha}'_{33}\big)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&+\sqrt{5}u_1\big(\eta_3, \alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&+\sqrt{5}u_1\big(\eta_3, \alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&-\sqrt{5}u_1\big(\eta_3, \alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&-\sqrt{5}u_1\big(\eta_3, \alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\\
&\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},
\end{aligned}
$$

gdzie N'''_{A_2} wynosi:

$$
\begin{aligned}
N'''_{A_2} &= \tfrac{1}{128}e^{-3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big\{-16e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\beta}_3^2+\mathring{\alpha}'^{\,2}_{31}+\mathring{\alpha}'^{\,2}_{33}\right)}+16e^{3\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\\
&-\big(5\mathring{\alpha}_{30}^2+2\sqrt{30}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{32}+6\mathring{\alpha}'^{\,2}_{32}+8\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}+8\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}+16\mathring{\alpha}'^{\,2}_{33}\big)\eta_3^2\times\\
&\quad e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2+\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}\\
&-\big(5\mathring{\alpha}_{30}^2+2\sqrt{30}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{32}+6\mathring{\alpha}'^{\,2}_{32}-8\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}-8\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}+16\mathring{\alpha}'^{\,2}_{33}\big)\eta_3^2\times\\
&\quad e^{\frac{1}{2}\eta_3^2\left(5\mathring{\beta}_3^2-\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}\\
&-2\big(5\mathring{\alpha}_{30}^2+6\mathring{\alpha}'^{\,2}_{32}+2\sqrt{30}\mathring{\alpha}'_{30}\mathring{\alpha}'_{32}-16\mathring{\alpha}'^{\,2}_{33}\big)\eta_3^2e^{\frac{5}{2}\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\\
&+16\big(4\mathring{\alpha}'^{\,2}_{33}\eta_3^2-1\big)e^{2\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big(1-e^{\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}_{30}^2+2\mathring{\alpha}'^{\,2}_{32}\right)}\Big)\Big\},
\end{aligned}
\tag{617}
$$

na reprezentację $\mathbf{B_2}$:

$$
\begin{aligned}
\psi_{vib3}^{(+);B_2}(\alpha_{3\mu}) = \sqrt{\tfrac{1}{N'''_{B_2}}}\tfrac{1}{16\sqrt{2}} \times \\
\Big\{2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
+2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
-2\sqrt{2}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\mathring{\alpha}_{30}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\mathring{\alpha}'_{31}\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\mathring{\alpha}'_{32}\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\mathring{\alpha}'_{33}\big) \\
-\sqrt{5}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{5}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}-\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}-\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}-\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{5}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{5}u_1\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
+\sqrt{3}u_0\big(\eta_3,\alpha_{30}+\tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{31}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big) \\
\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{32}+\tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}+\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3,\alpha'_{33}+\tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}-\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},
\end{aligned}
$$

gdzie N'''_{B_2} wynosi:

$$N'''_{B_2} = \frac{1}{128} e^{-3\eta_3^2 \mathring{\beta}_3^2} \Big\{ -16 e^{2\eta_3^2 \left(\mathring{\beta}_3^2 + \mathring{\alpha}'^2_{31} + \mathring{\alpha}'^2_{33}\right)} + 16 e^{3\eta_3^2 \mathring{\beta}_3^2}$$
$$+ \big(5\mathring{\alpha}_{30}^2 + 2\sqrt{30}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{32} + 6\mathring{\alpha}'^2_{32} + 8\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33} + 8\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33} + 16\mathring{\alpha}'^2_{33}\big)\eta_3^2 \times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2 \left(5\mathring{\beta}_3^2 + \sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}$$
$$+ \big(5\mathring{\alpha}_{30}^2 + 2\sqrt{30}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{32} + 6\mathring{\alpha}'^2_{32} - 8\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33} - 8\sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33} + 16\mathring{\alpha}'^2_{33}\big)\eta_3^2 \times$$
$$e^{\frac{1}{2}\eta_3^2 \left(5\mathring{\beta}_3^2 - \sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31}\mathring{\alpha}'_{32} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30}\mathring{\alpha}'_{33} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32}\mathring{\alpha}'_{33}\right)}$$
$$+2\big(5\mathring{\alpha}_{30}^2 + 6\mathring{\alpha}'^2_{32} + 2\sqrt{30}\mathring{\alpha}'_{30}\mathring{\alpha}'_{32} - 16\mathring{\alpha}'^2_{33}\big)\eta_3^2 e^{\frac{5}{2}\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}$$
$$+16\big(4\mathring{\alpha}'^2_{33}\eta_3^2 - 1\big) e^{2\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big(1 - e^{\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}_{30}^2 + 2\mathring{\alpha}'^2_{32}\right)}\Big)\Big\}, \qquad (618)$$

na reprezentację **E**:
Pierwszy wektor bazowy:

$$\psi^{(-);E}_{vib3;1}(\alpha_{3\mu}) = \sqrt{\frac{1}{N'''_{E_1}}} \frac{1}{4} \times$$
$$\Big\{ u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \mathring{\alpha}'_{31}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+ u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+ u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33}\big)$$
$$+ u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \mathring{\alpha}_{30}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \mathring{\alpha}'_{31}\big) u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \mathring{\alpha}'_{32}\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \mathring{\alpha}'_{33}\big)\Big\},$$

gdzie N'''_{E1} wynosi:

$$N'''_{E1} = \frac{1}{4} e^{-\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2} \Big\{ e^{\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}_{30}^2 + 2\mathring{\alpha}'^2_{32}\right)} + 1 \Big\} \Big\{ e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}'^2_{31} + \mathring{\alpha}'^2_{33}\right)} - 4\eta_3^2\mathring{\alpha}'^2_{33} + 1 \Big\}. \qquad (619)$$

Drugi wektor bazowy:

$$\psi^{(-);E}_{vib3;2}(\alpha_{3\mu}) = \sqrt{\tfrac{1}{N'''_{E2}}\tfrac{1}{8\sqrt{2}}} \times$$

$$\Big\{-\sqrt{5}u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} - \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} - \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} - \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{5}u_1\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$-\sqrt{3}u_0\big(\eta_3, \alpha_{30} + \tfrac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{5}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{31} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{3}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{32})\big)$$
$$\times u_1\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{32} + \tfrac{1}{4}(\sqrt{10}\mathring{\alpha}'_{31} + \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{33})\big)u_0\big(\sqrt{2}\eta_3, \alpha'_{33} + \tfrac{1}{4}(-\sqrt{5}\mathring{\alpha}_{30} - \sqrt{6}\mathring{\alpha}'_{32})\big)\Big\},$$

gdzie N'''_{E2} wynosi:

$$N'''_{E2} = \tfrac{1}{4}e^{-\eta_3^2\mathring{\beta}_3^2}\Big\{e^{\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}_{30}^2 + 2\mathring{\alpha}'^2_{32}\right)} + 1\Big\}\Big\{e^{2\eta_3^2\left(\mathring{\alpha}'^2_{31} + \mathring{\alpha}'^2_{33}\right)} - 4\eta_3^2\mathring{\alpha}'^2_{33} + 1\Big\}. \tag{620}$$

C.3 Funkcje rotacyjne

Część rotacyjna otrzymana jest analogicznie jak dla grupy symetryzacji $\overline{O}$. Zatem rotacyjne funkcje bazowe posiadają budowę zgodną z łańcuchem grupowym $\overline{D}_{4;y} \supset \overline{D}_2$ i mają następującą strukturę:

$$R^{J\ M}_{\Gamma_3\ \Gamma'_3}(\Omega), \tag{621}$$

gdzie Γ_3- nieprzywiedlna reprezentacja grupy $\overline{D}_{4;y}$, Γ'_3-dla grupy $\overline{D}_2$.

Otrzymane funkcje rotacyjne dla momentu pędu $J = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ mają postać:

$$\mathbf{J = 0} \tag{622}$$

$$R^{J=0M=0}_{A1A1}(\Omega) = r^{(+)0}_{00}(\Omega),$$

$$\mathbf{J = 1} \tag{623}$$

$$\begin{aligned}
R^{J=1M}_{A_2B_3}(\Omega) &= r^{(+)1}_{M1}(\Omega),\\
R^{J=1M}_{EB_1}(\Omega) &= r^{(-)1}_{M1}(\Omega),\\
R^{J=1M}_{EB_2}(\Omega) &= -r^{(+)1}_{M0}(\Omega),
\end{aligned}$$

$$\mathbf{J = 2} \tag{624}$$

$$\begin{aligned}
R^{J=2M}_{A_1A_1}(\Omega) &= \frac{1}{2}(r^{(+)2}_{M0}(\Omega) + \sqrt{3}r^{(+)2}_{M2}(\Omega)),\\
R^{J=2M}_{B_1A_1}(\Omega) &= \sqrt{\frac{3}{4}}(r^{(+)2}_{M0}(\Omega) - \frac{\sqrt{3}}{3}r^{(+)2}_{M2}(\Omega)),\\
R^{J=2M}_{B_2B_3}(\Omega) &= r^{(-)2}_{M1}(\Omega),\\
R^{J=2M}_{EB_1}(\Omega) &= r^{(+)2}_{M1}(\Omega),\\
R^{J=2M}_{EB_2}(\Omega) &= r^{(-)2}_{M2}(\Omega),
\end{aligned}$$

$$\mathbf{J = 3} \tag{625}$$

$$
\begin{aligned}
R^{J=3M}_{B_1A_1}(\Omega) &= r^{(-)3}_{M2}(\Omega),\\
R^{J=3M}_{A_2B_3}(\Omega) &= \sqrt{\frac{3}{8}}(r^{(+)3}_{M1}(\Omega) + \sqrt{\frac{5}{3}}r^{(+)3}_{M3}(\Omega)),\\
R^{J=3M}_{B_2B_3}(\Omega) &= \sqrt{\frac{5}{8}}(r^{(+)3}_{M1}(\Omega) - \sqrt{\frac{3}{5}}r^{(+)3}_{M3}(\Omega)),\\
R^{J=3M}_{E;1B_1}(\Omega) &= r^{(-)3}_{M1}(\Omega),\\
R^{J=3M}_{E;1B_2}(\Omega) &= \frac{1}{2}(\sqrt{\frac{3}{2}}r^{(+)3}_{M0}(\Omega) - \sqrt{\frac{5}{2}}r^{(+)3}_{M2}(\Omega)),\\
R^{J=3M}_{E;2B_1}(\Omega) &= r^{(-)3}_{M3}(\Omega),\\
R^{J=3M}_{E;2B_2}(\Omega) &= \frac{1}{2}(-\sqrt{\frac{5}{2}}r^{(+)3}_{M0}(\Omega) - \sqrt{\frac{3}{2}}r^{(+)3}_{M2}(\Omega)),
\end{aligned}
$$

$$\mathbf{J = 4} \tag{626}$$

$$
\begin{aligned}
R^{J=4M}_{A_{1;1}A_1}(\Omega) &= \frac{2}{3}(r^{(+)4}_{M0}(\Omega) - \frac{\sqrt{5}}{2}r^{(+)4}_{M2}(\Omega)),\\
R^{J=4M}_{A_{1;2}A_1}(\Omega) &= \sqrt{\frac{2}{11}}(\sqrt{\frac{7}{2}}r^{(+)4}_{M2}(\Omega) + \sqrt{2}r^{(+)4}_{M4}(\Omega)),\\
R^{J=4M}_{A_2B_3}(\Omega) &= \sqrt{\frac{7}{8}}(r^{(-)4}_{M1}(\Omega) - \frac{1}{\sqrt{7}}r^{(-)4}_{M3}(\Omega)),\\
R^{J=4M}_{B_1A_1}(\Omega) &= \frac{1}{2\sqrt{2}}(\sqrt{\frac{5}{2}}r^{(+)4}_{M0}(\Omega) + \sqrt{2}r^{(+)4}_{M2}(\Omega) - \sqrt{\frac{7}{2}}r^{(+)4}_{M4}(\Omega)),\\
R^{J=4M}_{B_2B_3}(\Omega) &= \frac{1}{2\sqrt{2}}(r^{(-)4}_{M1}(\Omega) + \sqrt{7}r^{(-)4}_{M3}(\Omega)),\\
R^{J=4M}_{E;1B_1}(\Omega) &= r^{(+)4}_{M1}(\Omega),\\
R^{J=4M}_{E;1B_2}(\Omega) &= \frac{1}{2\sqrt{2}}(\sqrt{7}r^{(-)4}_{M4}(\Omega) - r^{(-)4}_{M2}(\Omega),\\
R^{J=4M}_{E;2B_1}(\Omega) &= r^{(+)4}_{M3}(\Omega),\\
R^{J=4M}_{E;2B_2}(\Omega) &= \frac{1}{2\sqrt{2}}(r^{(-)4}_{M4}(\Omega) + \sqrt{7}r^{(-)4}_{M2}(\Omega),
\end{aligned}
$$

$$\mathbf{J=5} \tag{627}$$

$$
\begin{aligned}
R^{J=5M}_{A_1A_1}(\Omega) &= \frac{\sqrt{3}}{2}(r^{(-)5}_{M2}(\Omega) - \frac{1}{\sqrt{3}}r^{(-)5}_{M4}(\Omega),\\
R^{J=5M}_{B_1A_1}(\Omega) &= \frac{1}{2}(r^{(-)5}_{M2}(\Omega) + \sqrt{3}r^{(-)5}_{M4}(\Omega),\\
R^{J=5M}_{A_{2;1}B_3}(\Omega) &= \frac{3}{\sqrt{51}}(r^{(+)5}_{M1}(\Omega) - \frac{\sqrt{42}}{3}r^{(+)5}_{M3}(\Omega)),\\
R^{J=5M}_{A_{2;2}B_3}(\Omega) &= \frac{1}{\sqrt{6}}(\sqrt{5}r^{(+)5}_{M3}(\Omega) + r^{(+)5}_{M5}(\Omega)),\\
R^{J=5M}_{B_2B_3}(\Omega) &= \frac{\sqrt{7}}{4}(r^{(+)5}_{M1}(\Omega) + \frac{\sqrt{42}}{14}r^{(+)5}_{M3}(\Omega) - \frac{\sqrt{210}}{14}r^{(+)5}_{M5}(\Omega)),\\
R^{J=5M}_{E_1B_1}(\Omega) &= r^{(-)5}_{M1}(\Omega),\\
R^{J=5M}_{E_1B_2}(\Omega) &= \frac{1}{8\sqrt{2}}(-\sqrt{42}r^{(+)5}_{M4}(\Omega) + 2\sqrt{14}r^{(+)5}_{M2}(\Omega) - \sqrt{30}r^{(+)5}_{M0}(\Omega)),\\
R^{J=5M}_{E_2B_1}(\Omega) &= r^{(-)5}_{M3}(\Omega),\\
R^{J=5M}_{E_2B_2}(\Omega) &= \frac{1}{8\sqrt{2}}(-9r^{(+)5}_{M4}(\Omega) - 2\sqrt{3}r^{(+)5}_{M2}(\Omega) + \sqrt{35}r^{(+)5}_{M0}(\Omega)),\\
R^{J=5M}_{E_3B_1}(\Omega) &= r^{(-)5}_{M5}(\Omega),\\
R^{J=5M}_{E_3B_2}(\Omega) &= \frac{1}{8\sqrt{2}}(-\sqrt{5}r^{(+)5}_{M4}(\Omega) - 2\sqrt{15}r^{(+)5}_{M2}(\Omega) - 3\sqrt{7}r^{(+)5}_{M0}(\Omega)).
\end{aligned}
$$

Funkcje bazowe opisujące kwadrupolową część wibracyjną należące do reprezentacji A_1 i B_1 transformują się jak odpowiednie wektory bazy kartezjańskiej dla podanych reprezentacji, tj. jak funkcje y^2 oraz $x^2 - z^2$.

W przypadku funkcji opisującej oktupolową część wibracyjną otrzymane funkcje należą do dwuwymiarowej reprezentacji E. Funkcje określone jako pierwszy wektor bazowy transformują się jak funkcja x, a funkcje opisane jako drugi wektor bazowy transformują się jak z.

Dla części rotacyjnej funkcje bazowe $R^{JM}_{\Gamma_1\Gamma_1'}$, gdzie Γ_1 jest reprezentacją jednowymiarową, transformują się zgodnie z bazami kartezjańskimi dla A_1, A_2, B_1 i B_2 (dodatek A.2). W przypadku reprezentacji dwuwymiarowej E funkcje rotacyjne $R^{JM}_{E\,B_1}$ transformują się jak kartezjański wektor bazowy x, a $R^{J}_{E\,B_2}$ jak funkcja bazowa z.

D Rozkład prawdopodobieństwa orientacji wektora momentu pędu dla funkcji bazowych

W tym dodatku przedstawione jest wyprowadzenie wzoru na prawdopodobieństwo orientacji wektora momentu pędu dla funkcji bazowych występujących w opisie pasm energetycznych dla modelu kolektywnego o zmiennych rzeczywistych (R). Znaleziony rozkład prawdopodobieństwa opisuje rzut wektora momentu pędu o wartości równej K na określoną oś $\vec{n}$. Otrzymane wyniki pozwalają przedstawić graficznie rozkłady pradopodobieństwa orientacji wektora momentu pędu dla funkcji bazowych opisujących stany tego modelu, dzięki czemu można zobaczyć, który z kierunków dla danego stanu jest dominujący.

Przedstawione poniżej obliczenia zostały zrobione dla układu wewnętrznego, ze zdefiniowanym we wcześniejszym rozdziale działaniem grupy wewnętrznej $\overline{G} = \overline{D}_{4;y}$ na kąty Eulera Ω. Podobne obliczenia były wcześniej wykonane dla prawego przesunięcia użytego jako działanie w układzie wewnętrznym w pracach doktorskich [13] i [14].

Rozważmy zagadnienie własne trzeciej składowej operatora momentu pędu $\hat{J}_3$ w układzie wewnętrznym:

$$\hat{J}_3 r^J_{MK}(\Omega) = K r^J_{MK}(\Omega), \tag{628}$$

gdzie $r^J_{MK}(\Omega) = \sqrt{2J+1} D^J_{MK}(\Omega)^*$.

Ponieważ chcemy mieć operator dający wartość K rzutu momentu pędu $\hat{\vec{J}}$ na określoną oś $\vec{n}$, zatem trzeba, korzystając z (628), utworzyć nowy operator $\hat{J}'_3 = \vec{n} \cdot \hat{\vec{J}}$, tak aby kierunek nowej trzeciej składowej momentu pędu był zgodny w wybraną osią $\vec{n}$. Zatem rzut wektora momentu pędu $\hat{\vec{J}}$ na wektor o określonym kierunku $\vec{n}(\Omega_{\vec{n}})$ opisany przez kąty Eulera $\Omega_{\vec{n}}$ ma postać:

$$\hat{J}'_3 = \vec{n} \cdot \hat{\vec{J}} = \overline{\mathcal{R}}(\Omega_{\vec{n}}) \hat{\vec{J}}_3 \overline{\mathcal{R}}^\dagger(\Omega_{\vec{n}}), \tag{629}$$

gdzie $\overline{\mathcal{R}}(\Omega_{\vec{n}})$ określa pewien obrót w układzie wewnętrznym o kąty Eulera $\Omega_{\vec{n}}$. Działając obrotami $\overline{\mathcal{R}}(\Omega_{\vec{n}})$ na równanie (628) oraz korzystając z tożsamości $\overline{\mathcal{R}}(\Omega_{\vec{n}})^\dagger \overline{\mathcal{R}}(\Omega_{\vec{n}}) = \hat{\mathbb{I}}$ otrzymujemy następującą równość:

$$\overline{\mathcal{R}}(\Omega_{\vec{n}}) \hat{J}_3 \overline{\mathcal{R}}(\Omega_{\vec{n}})^\dagger \overline{\mathcal{R}}(\Omega_{\vec{n}}) r^J_{MK}(\Omega) = K \overline{\mathcal{R}}(\Omega_{\vec{n}}) r^J_{MK}(\Omega), \tag{630}$$

która definiuje kąty $\Omega_{\vec{n}}$. Ponieważ obroty w przestrzeni $\overline{SO(3)}$ są unitarne równanie (630) można inaczej zapisać jako:

$$(\vec{n} \cdot \hat{\vec{J}}) \xi^J_{MK}(\vec{n}, \Omega) = K \xi^J_{MK}(\vec{n}, \Omega), \tag{631}$$

gdzie nowa funkcja $\xi^J_{MK}(\vec{n},\Omega)$ otrzymana jest z obrotu funkcji $r^J_{MK}(\Omega)$ o kąty Eulera $\Omega_{\vec{n}}$, tj. $\xi^J_{MK}(\vec{n},\Omega) = \overline{\mathcal{R}}(\Omega_{\vec{n}})r^J_{MK}(\Omega)$. Korzystając z działania grupy wewnętrznej na $r^J_{MK}(\Omega)$, dla nowej funkcji $\xi^J_{MK}(\vec{n},\Omega)$ mamy, [57]:

$$\begin{aligned}\xi^J_{MK}(\vec{n},\Omega) = \overline{\mathcal{R}}(\Omega_{\vec{n}})r^J_{MK}(\Omega) = r^J_{MK}(\Omega\Omega^{-1}_{\vec{n}}) = \textstyle\sum_{K'} D^{J\,*}_{K'K}(\Omega^{-1}_{\vec{n}})r^J_{MK'}(\Omega)\\ = \textstyle\sum_{K'} D^J_{KK'}(\Omega_{\vec{n}})r^J_{MK'}(\Omega).\end{aligned} \tag{632}$$

Ponieważ $\xi^J_{MK}(\vec{n},\Omega)$ są funkcjami własnymi operatora $\vec{n}\cdot\hat{\vec{J}}$ i posiadają wartości własne K, zatem można otrzymać odpowiedni operator rzutowy [13], [14]:

$$\hat{P}(\vec{n},K) = |\xi^J_{MK}(\vec{n},\Omega)\rangle\langle\xi^J_{MK}(\vec{n},\Omega)|. \tag{633}$$

Pozwala to otrzymać rozkład spektralny operatora $\vec{n}\cdot\hat{\vec{J}}$ w postaci:

$$(\vec{n}\cdot\hat{\vec{J}}) = \sum_{K=-J}^{J} K\hat{P}(\vec{n},K). \tag{634}$$

Stany wykorzystywane w naszych obliczeniach o momencie pędu J i parzystości p opisane są w przestrzeni wibracyjno-rotacyjnej i ogólnie można je zapisać:

$$\Phi^{J^pM}_{\nu} = \sum_A \Psi^{J^pM}_{\nu A}, \tag{635}$$

gdzie funkcje pomocnicze $\Psi^{J^pM}_{\nu A}$ złożone są z sum iloczynów trzech funkcji bazowych wyznaczonych odpowiednio dla części wibracyjnej kwadrupolowej $\psi^{\Gamma_{1;\kappa_1}}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22})$, oktupolowej $\psi^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}_{vib3}(\{\alpha_{3\mu}\})$ oraz rotacyjnej $R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3}}(\Omega) = \sum_{K''} b_{K''}r^J_{MK''}(\Omega)$. Pełny opis tej funkcji ma postać:

$$\Psi^{J^pM}_{\nu A} = \textstyle\sum_a w^{\nu A}_a \psi^{\Gamma_{1;\kappa_1}}_{vib2;a_1}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}_{vib3;a_2}(\{\alpha_{3\mu}\})R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3};a_3}(\Omega), \tag{636}$$

gdzie odpowiednio dla reprezentacji Γ_1, Γ_2 i Γ_3 symbol $w^{\nu A}_a$ oznacza współczynniki otrzymane dla iloczynów trzech funkcji bazowych, a indeks $a = (a_1,a_2,a_3)$ numeruje te werktory oraz $A = (\Gamma_{1;\kappa_1},\Gamma_{2;\kappa_2},\Gamma_{3;\kappa_3})$ odpowiada zbiorowi liczb kwantowych określających funkcje bazowe wchodzące w skład stanu:

(i) ν rozróżnia stany o identycznym momencie pędu i parzystości,

(ii) Γ_1, Γ_2, Γ_3 są reprezentacjami do których należą odpowiednio funkcje opisujące część wibracyjną kwadrupolową, oktupolową oraz rotacyjną,

(iii) $\kappa_i,\ i = 1,2,3$ rozróżnia równoważne reprezentacje Γ_i występujące w funkcji $\Psi^{J^pM}_{\nu A}$,

(iv) $a_i,\ i = 1,2,3$ znakuje wektory bazowe rozpinające reprezentację Γ_i.

Oznaczenia jakie zostały wprowadzone dla poszczególnych reprezentacji równoważnych, wraz z wektorami bazowymi je rozpinającymi, są przedstawione w dodatku C.

Ze względu na to, że interesuje nas rozkład prawdopodobieństwa orientacji wektora momentu pędu dla każdej z funkcji pomocniczych $\Psi^{J^pM}_{\nu A}$, zatem jego postać można znaleźć ze wzoru:

$$\begin{aligned}\mathrm{Prob}(\vec{n},K;\Psi^{J^pM}_{\nu A}) = \langle\Psi^{J^pM}_{\nu A}|\hat{P}(\vec{n},K)|\Psi^{J^pM}_{\nu A}\rangle\\ = \textstyle\int_{\mathbb{R}^2} d\alpha_{2\nu}\int_{\mathbb{R}^4} d\alpha'_{3\mu}\int_{SO(3)} d\Omega \Psi^{J^pM}_{\nu A}{}^{*}\hat{P}(\vec{n},K)\Psi^{J^pM}_{\nu A}.\end{aligned} \tag{637}$$

Ponieważ operator $\hat{P}(\vec{n},K)$ działa jedynie na zmienne rotacyjne, zatem powyższy wzór można przepisać w postaci:

$$\begin{aligned}\mathrm{Prob}(\vec{n},K;\Psi^{J^pM}_{\nu A}) = \langle\Psi^{J^pM}_{\nu A}|\hat{P}(\vec{n},K)|\Psi^{J^pM}_{\nu A}\rangle\\ = \textstyle\sum_{a'}\sum_{a} w^{\nu A}_{a'}{}^{*} w^{\nu A}_{a}\langle\psi^{\Gamma_1;\kappa_1}_{vib2;a'_1}(\alpha_{20},\alpha_{22})|\psi^{\Gamma_1;\kappa_1}_{vib2;a_1}(\alpha_{20},\alpha_{22})\rangle\\ \times\langle\psi^{p;\Gamma_2;\kappa_2}_{vib3;a'_2}(\{\alpha_{3\mu}\})|\psi^{p;\Gamma_2;\kappa_2}_{vib3;a_2}(\{\alpha_{3\mu}\})\rangle\langle R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3};a'_3}(\Omega)|\hat{P}(\vec{n},K)|R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3};a_3}(\Omega)\rangle.\end{aligned} \tag{638}$$

Powyższy wzór można uprościć korzystając z ortonormalności funkcji bazowych:

$$\begin{aligned}\mathrm{Prob}(\vec{n},K;\Psi^{J^pM}_{\nu A}) = \langle\Psi^{J^pM}_{\nu A}|\hat{P}(\vec{n},K)|\Psi^{J^pM}_{\nu A}\rangle\\ = \textstyle\sum_{a_1,a_2,a_3,a'_3} w^{\nu A\,*}_{a_1,a_2,a'_3} w^{\nu A}_{a_1,a_2,a_3}\langle R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3};a'_3}(\Omega)|\hat{P}(\vec{n},K)|R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3};a_3}(\Omega)\rangle\\ = \textstyle\sum_{a_3,a'_3}\big(\sum_{a_1,a_2} w^{\nu A\,*}_{a_1,a_2,a'_3} w^{\nu A}_{a_1,a_2,a_3}\big)\langle R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3};a'_3}(\Omega)|\hat{P}(\vec{n},K)|R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3};a_3}(\Omega)\rangle.\end{aligned} \tag{639}$$

Dla modelu (R) funkcje bazowe wchodzące w skład stanów mają jedną z trzech możliwych postaci:

(a) Pierwsza postać to funkcje $\psi^{\Gamma_1;\kappa_1}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi^{p;\Gamma_2;\kappa_2}_{vib3}(\{\alpha_{3\mu}\}))R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3}}(\Omega)$, dla których wszystkie reprezentacje $\Gamma_i,\ i = 1,2,3$ są reprezentacjami jednowymiarowymi, w modelu (R) są to dwie z czterech reprezentacji jednowymiarowych A_1 i B_1.

(b) Druga i trzecia to funkcje $\psi_{vib2}^{\Gamma_{1;\kappa_1}}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi_{vib3}^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}(\{\alpha_{3\mu}\})R_{\Gamma_{3;\kappa_3}}^{JM}(\Omega)$, dla których Γ_1 jest reprezentacją jednowymiarową a Γ_i, $i = 2,3$ dwuwymiarową. Dla tego przypadku są dwie możliwe funkcje pomocnicze w zależności do jakiej reprezentacji należy kwadrupolowa funkcja $\psi_{vib2}^{\Gamma_1}(\alpha_{20},\alpha_{22})$, tj. dla modelu (R) mamy $\Gamma_1 = A_1, B_1$.

   – Dla $\Gamma_1 = A_1$ funkcja pomocnicza ma postać:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_{vib2;1}^{A_1}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi_{vib3;1}^{p;E}(\{\alpha_{3\mu}\})R_{E;1}^{JM}(\Omega) \\ +\psi_{vib2;1}^{A_1}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi_{vib3;2}^{p;E}(\{\alpha_{3\mu}\})R_{E;2}^{JM}(\Omega)\}. \quad (640)$$

   – Dla $\Gamma_1 = B_1$ funkcja pomocnicza ma postać:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_{vib2;1}^{B_1}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi_{vib3;1}^{p;E}(\{\alpha_{3\mu}\})R_{E;1}^{JM}(\Omega) \\ -\psi_{vib2;1}^{B_1}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi_{vib3;2}^{p;E}(\{\alpha_{3\mu}\})R_{E;2}^{JM}(\Omega)\}. \quad (641)$$

   Dodatkowe indeksy 1, 2 określają który z wektorów wchodzi w skład poszczególnych funkcji.

Ponieważ funkcje bazowe są unormowane, zatem wzory na rozkład prawdopodobieństwa dla poszczególnych funkcji bazowych mają formę przedstawioną poniżej:

(a) Dla funkcji $\psi_{vib2}^{\Gamma_{1;\kappa_1}}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi_{vib3}^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}(\{\alpha_{3\mu}\})R_{\Gamma_{3;\kappa_3}}^{JM}(\Omega)$ wzór (638) może być zapisany następująco:

$$\mathrm{Prob}(\vec{n},K;\Psi_{\nu A}^{J^pM}) = \langle\Psi_{\nu A}^{J^pM}|\hat{P}(\vec{n},K)|\Psi_{\nu A}^{J^pM}\rangle \\ = \langle R_{\Gamma_{3;\kappa_3}}^{JM}(\Omega)|\hat{P}(\vec{n},K)|R_{\Gamma_{3;\kappa_3}}^{JM}(\Omega)\rangle, \quad (642)$$

   gdzie $R_{\Gamma_{3;\kappa_3}}^{JM}(\Omega) = \sum_{K'} b_{K'} r_{MK'}^J(\Omega)$.

   Zatem korzystając z (633), dla części rotacyjnej, otrzymujemy:

$$\langle R_{\Gamma_{3;\kappa_3}}^{JM}(\Omega)|\hat{P}(\vec{n},K)|R_{\Gamma_{3;\kappa_3}}^{JM}(\Omega)\rangle \\ = \langle R_{\Gamma_{3;\kappa_3}}^{JM}(\Omega)|\xi_{MK}^J(\vec{n})\rangle\langle\xi_{MK}^J(\vec{n})|R_{\Gamma_{3;\kappa_3}}^{JM}(\Omega)\rangle \\ = |\int_{SO(3)} d\Omega R_{\Gamma_{3;\kappa_3}}^{JM}(\Omega)^*\xi_{MK}^J(\vec{n})|^2. \quad (643)$$

   Korzystając z postaci funkcji $\xi_{MK}^J(\vec{n},\Omega)$ przedstawionej w (632) oraz postaci funkcji rotacyjnej, tj. $R_{\Gamma_{3;\kappa_3}}^{JM}(\Omega)^* = \sum_{K''} b_{K''}^* r_{MK''}^J(\Omega)^*$ otrzymujemy:

$$\langle R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3}}(\Omega)|\hat{P}(\vec{n},K)|R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3}}(\Omega)\rangle$$
$$= |\int_{SO(3)} d\Omega \sum_{K'} D^J_{KK'}(\Omega_{\vec{n}}) r^J_{MK'}(\Omega) \sum_{K''} b^*_{K''} r^J_{MK''}(\Omega)^*|^2. \tag{644}$$

Następnie z ortogonalności funkcji rotacyjnych, tj.:

$$\frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{\pi} d\beta \sin(\beta) \int_0^{2\pi} d\gamma r^{J_2}_{M_2 M_2'}(\Omega)^* r^{J_1}_{M_1 M_1'}(\Omega)$$
$$= \delta_{J_1 J_2}\delta_{M_1 M_2}\delta_{M_1' M_2'} \tag{645}$$

mamy:

$$\langle R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3}}(\Omega)|\hat{P}(\vec{n},K)|R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3}}(\Omega)\rangle$$
$$= |\sum_{K'K''} b^*_{K''} D^J_{KK'}(\Omega_{\vec{n}}) \int_{SO(3)} d\Omega r^J_{MK'}(\Omega) r^J_{MK''}(\Omega)^*|^2$$
$$= |\sum_{K'} b^*_{K'} D^J_{KK'}(\Omega_{\vec{n}})|^2$$
$$= |\sum_{K'} b^*_{K'} e^{-iK\Omega_{\vec{n};1}} d^J_{KK'}(\Omega_{\vec{n};2}) e^{-iK'\Omega_{\vec{n};3}}|^2, \tag{646}$$

gdzie $\Omega_{\vec{n}} = (\Omega_{\vec{n};1}, \Omega_{\vec{n};2}, \Omega_{\vec{n};3})$. Ponieważ wartość K jest ustalona, zatem w (646) mamy zależność jedynie od dwóch kątów Eulera $\Omega_{\vec{n};2}$ i $\Omega_{\vec{n};3}$:

$$\langle R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3}}(\Omega)|\hat{P}(\vec{n},K)|R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3}}(\Omega)\rangle$$
$$= |\sum_{K'} b^*_{K'} d^J_{KK'}(\Omega_{\vec{n};2}) e^{-iK'\Omega_{\vec{n};3}}|^2. \tag{647}$$

W powyższym wzorze kąty Eulera $\Omega_{\vec{n};2}$ i $\Omega_{\vec{n};3}$ można zinterpretować jako kąty sferyczne ϕ, θ, co daje:

$$\langle R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3}}(\Omega)|\hat{P}(\vec{n},K)|R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3}}(\Omega)\rangle$$
$$= |\sum_{K'} b^*_{K'} d^J_{KK'}(\theta) e^{-iK'\phi}|^2. \tag{648}$$

(b) Dla dwóch pozostałych funkcji zapisanych ogólnie jako

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi^{\Gamma_1}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi^{\Gamma_2;\,1}_{vib3}(\{\alpha_{3\mu}\})R^{JM}_{\Gamma_3;1}(\Omega)$$
$$\pm\psi^{\Gamma_1}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi^{\Gamma_2;\,2}_{vib3}(\{\alpha_{3\mu}\})R^{JM}_{\Gamma_3;2}(\Omega)\} \tag{649}$$

mamy:

$$\mathrm{Prob}(\vec{n},K;\Psi^{J^pM}_{\nu A}) = \langle\Psi^{J^pM}_{\nu A}|\hat{P}(\vec{n},K)|\Psi^{J^pM}_{\nu A}\rangle$$
$$= \frac{1}{2}\left\{\langle R^{JM}_{\Gamma_3;\,1}(\Omega)|\hat{P}(\vec{n},K)|R^{JM}_{\Gamma_3;\,1}(\Omega)\rangle + \langle R^{JM}_{\Gamma_3;\,2}(\Omega)|\hat{P}(\vec{n},K)|R^{JM}_{\Gamma_3;\,2}(\Omega)\rangle\right\}. \tag{650}$$

Ponieważ wektory rozpinające przestrzeń dwuwymiarową E są ortonormalne, zatem korzystając z (648) wzór (650) można zapisać:

$$\begin{aligned} &\mathrm{Prob}(\vec{n}, K; \Psi_{\nu A}^{J^p M}) = \\ &= \tfrac{1}{2}\left\{ \langle R_{\Gamma_3;\,1}^{JM}(\Omega)|\hat{P}(\vec{n}, K)|R_{\Gamma_3;\,1}^{JM}(\Omega)\rangle + \langle R_{\Gamma_3;\,2}^{JM}(\Omega)|\hat{P}(\vec{n}, K)|R_{\Gamma_3;\,2}^{JM}(\Omega)\rangle \right\} \\ &= \tfrac{1}{2}\left\{ |\textstyle\sum_{K'} b_{K'}^{1\,*} d_{KK'}^{J}(\theta) e^{-iK'\phi}|^2 + |\textstyle\sum_{K'} b_{K'}^{2\,*} d_{KK'}^{J}(\theta) e^{-iK'\phi}|^2 \right\}, \end{aligned} \tag{651}$$

gdzie

$$R_{\Gamma_3;\,i}^{JM}(\Omega) = \textstyle\sum_{K'} b_{K'}^{i} r_{MK'}^{J}(\Omega), \quad i = 1, 2.$$

W dalszych obliczeniach interesuje nas jedynie rzut na nową oś J_3', zatem obliczenia są przeprowadzone dla $K = J$.

E Rozkład prawdopodobieństwa funkcji bazowych dla grupy symetryzacji $\overline{D}_{4;y}$

W tym dodatku przedstawione są prawdopodobieństwa dla każdego z iloczynów trzech funkcji bazowych $\psi_{vib2}^{\Gamma_{1;\kappa_1}}(\alpha_{20}, \alpha_{22})$, $\psi_{vib3}^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}(\{\alpha_{3\mu}\})$ oraz $R_{\Gamma_{3;\kappa_3}}^{JM}(\Omega) = \sum_{K''} b_{K''} r_{MK''}^{J}(\Omega)$ z jakimi wchodzą one w skład stanu. Przedstawione wyniki dotyczą modelu o zmiennych rzeczywistych (R), w którym postać energetycznego pasma oktupolowego o parzystym momencie pędu posiada inną lub identyczną strukturę niż pozostałe dwa, tj. pasmo kwadrupolowe oraz oktupolowe o nieparzystym momencie pędu.

Zgodnie z definicją stanów używanych do budowy przedstawionych modeli w dodatku D mają one postać:

$$\Phi_{\nu}^{J^p M} = \sum_{A} \Psi_{\nu A}^{J^p M}, \tag{652}$$

gdzie funkcje pomocnicze $\Psi_{\nu A}^{J^p M}$ można zapisać w postaci:

$$\Psi_{\nu A}^{J^p M} = \textstyle\sum_a w_a^{\nu A} \psi_{vib2;a_1}^{\Gamma_{1;\kappa_1}}(\alpha_{20}, \alpha_{22}) \psi_{vib3;a_2}^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}(\{\alpha_{3\mu}\}) R_{\Gamma_{3;\kappa_3};a_3}^{JM}(\Omega), \tag{653}$$

gdzie odpowiednio dla reprezentacji Γ_1, Γ_2 i Γ_3 symbol $w_a^{\nu A}$ oznacza współczynniki otrzymane dla iloczynów trzech funkcji bazowych, ν rozróżnia stany o identycznym momencie pędu i parzystości, a indeks $a = (a_1, a_2, a_3)$ numeruje te wektory oraz $A = (\Gamma_{1;\kappa_1}, \Gamma_{2;\kappa_2}, \Gamma_{3;\kappa_3})$ odpowiada zbiorowi liczb kwantowych określających funkcje bazowe wchodzące w skład stanu.

Jak było wcześniej wspomniane interesuje nas prawdopodobieństwo dla każdego z iloczynów $\psi^{\Gamma_{1;\kappa_1}}_{vib2;a_1}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}_{vib3;a_2}(\{\alpha_{3\mu}\})R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3};a_3}(\Omega)$ z jakim wchodzi on w skład $\Phi^{J^pM}_\nu$. W tym celu wykorzystujemy operator rzutowy

$$\hat{P}_{\tilde{\Gamma}_{1;\tilde{\kappa}_1}\tilde{\Gamma}_{2;\tilde{\kappa}_2}\tilde{\Gamma}_{3;\tilde{\kappa}_3}} = |\psi^{\tilde{\Gamma}_{1;\tilde{\kappa}_1}}_{vib2;a_1}\psi^{p;\tilde{\Gamma}_{2;\tilde{\kappa}_2}}_{vib3;a_2}R^{JM}_{\tilde{\Gamma}_{3;\tilde{\kappa}_3};a_3}\rangle\langle\psi^{\tilde{\Gamma}_{1;\tilde{\kappa}_1}}_{vib2;a_1}\psi^{p;\tilde{\Gamma}_{2;\tilde{\kappa}_2}}_{vib3;a_2}R^{JM}_{\tilde{\Gamma}_{3;\tilde{\kappa}_3};a_3}| \tag{654}$$

działając nim na stany $\Phi^{J^pM}_\nu$. Otrzymujemy zatem następujący wzór:

$$\begin{aligned} &\mathrm{Prob}(\tilde{\Gamma}_{1;\tilde{\kappa}_1}\tilde{\Gamma}_{2;\tilde{\kappa}_2}\tilde{\Gamma}_{3;\tilde{\kappa}_3};\Phi^{J^pM}_\nu) = \\ &= \frac{|\langle\psi^{\tilde{\Gamma}_{1;\tilde{\kappa}_1}}_{vib2;a_1}\psi^{p;\tilde{\Gamma}_{2;\tilde{\kappa}_2}}_{vib3;a_2}R^{JM}_{\tilde{\Gamma}_{3;\tilde{\kappa}_3};a_3}|\Phi^{J^pM}_\nu\rangle|^2}{\langle\Phi^{J^pM}_\nu|\Phi^{J^pM}_\nu\rangle} = \frac{\langle\Phi^{J^pM}_\nu|\hat{P}_{\tilde{\Gamma}_{1;\tilde{\kappa}_1}\tilde{\Gamma}_{2;\tilde{\kappa}_2}\tilde{\Gamma}_{3;\tilde{\kappa}_3}}|\Phi^{J^pM}_\nu\rangle}{\langle\Phi^{J^pM}_\nu|\Phi^{J^pM}_\nu\rangle} \\ &= \frac{1}{\langle\Phi^{J^pM}_\nu|\Phi^{J^pM}_\nu\rangle}\sum_{A',A}\sum_{a',a} w^{\nu A'}_{a'}{}^* w^{\nu A}_a \\ &\times\langle\psi^{\Gamma'_{1;\kappa'_1}}_{vib2;a'_1}\psi^{p;\Gamma'_{2;\kappa'_2}}_{vib3;a'_2}R^{JM}_{\Gamma'_{3;\kappa'_3};a'_3}|\psi^{\tilde{\Gamma}_{1;\tilde{\kappa}_1}}_{vib2;a_1}\psi^{p;\tilde{\Gamma}_{2;\tilde{\kappa}_2}}_{vib3;a_2}R^{JM}_{\tilde{\Gamma}_{3;\tilde{\kappa}_3};a_3}\rangle \\ &\times\langle\psi^{\tilde{\Gamma}_{1;\tilde{\kappa}_1}}_{vib2;a_1}\psi^{p;\tilde{\Gamma}_{2;\tilde{\kappa}_2}}_{vib3;a_2}R^{JM}_{\tilde{\Gamma}_{3;\tilde{\kappa}_3};a_3}|\psi^{\Gamma'_{1;\kappa'_1}}_{vib2;a'_1}\psi^{p;\Gamma'_{2;\kappa'_2}}_{vib3;a'_2}R^{JM}_{\Gamma'_{3;\kappa'_3};a'_3}\rangle, \end{aligned} \tag{655}$$

gdzie $\langle\Phi^{J^pM}_\nu|\Phi^{J^pM}_\nu\rangle$ jest kwadratem normy stanu $\Phi^{J^pM}_\nu$.

Przy obliczeniach trzeba pamiętać, że wektory bazowe należące do różnych równoważnych reprezentacji funkcji opisujących każdy z rodzajów ruchu są unormowane, ale nie muszą być ortogonalne.

Do obliczenia wartości szukanych prawdopodobieństw potrzebne są pełne postacie funkcji opisujące poszczególne stany. Zgodnie z tym co zostało przedstawione w 6.2.4 rozważane stany mają postać:

(a) **Stan 0$^+$** składa się jedynie z jednej funkcji, zatem jego postać jest następująca:

$$\Phi^{0^+M} = \psi^{A_1}_{vib2}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi^{(+);A_1}_{vib3}(\{\alpha_{3\nu'}\})R^{JM}_{A_1}(\Omega). \tag{656}$$

(b) **Stan 2$^+$** można uzyskać na dwa sposoby:

$$\begin{aligned} &\Psi^{2(+)M}_{\Gamma_1A_1\Gamma_3} = \\ &= w_1\psi^{\Gamma_1}_{vib2;u_0u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=2M}_{\Gamma_3} + w_2\psi^{\Gamma_1}_{vib2;u_1u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=2M}_{\Gamma_3} \\ &+w_3\psi^{\Gamma_1}_{vib2;u_0u_1}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=2M}_{\Gamma_3}, \end{aligned} \tag{657}$$

gdzie $\Gamma_1=\Gamma_3=A_1,\ B_1$.

(c) **Stan 4$^+$** posiada dwie postacie, w zależności od wyboru nieprzywiedlnej reprezentacji opisującej wibracyjną część kwadrupolową oraz część

rotacyjną $\Gamma_1 = \Gamma_3 = A_1,\ B_1$. W przypadku, gdy $\Gamma_1 = \Gamma_3 = A_1$ mamy:

$$\begin{aligned} &\Psi^{4(+)M}_{A_1A_1A_1} = \\ &= w_1\psi^{A_1}_{vib2;u_0u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{A_{1;1}} + w_2\psi^{A_1}_{vib2;u_1u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{A_{1;1}} \\ &+w_3\psi^{A_1}_{vib2;u_0u_1}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{A_{1;1}} + w_4\psi^{A_1}_{vib2;u_0u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{A_{1;2}} \\ &+w_5\psi^{A_1}_{vib2;u_1u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{A_{1;2}} + w_6\psi^{A_1}_{vib2;u_0u_1}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{A_{1;2}}. \end{aligned} \tag{658}$$

Dla $\Gamma_1 = \Gamma_3 = B_1$ stan 4^+ ma postać:

$$\begin{aligned} &\Psi^{4(+)M}_{B_1A_1B_1} = \\ &= w_1\psi^{B_1}_{vib2;u_0u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{B_1} + w_2\psi^{B_1}_{vib2;u_1u_0}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{B_1} \\ &+w_3\psi^{B_1}_{vib2;u_0u_1}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{J=4M}_{B_1}. \end{aligned} \tag{659}$$

(d) **Stan 3⁻** również można zapisać na dwa sposoby:

$$\begin{aligned} &\Psi^{3(-)M}_{\Gamma_1EE} = \\ &= w_1\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_1u_0u_0u_0}R^{J=3M}_{E;1} + w_2\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_1u_0u_0u_0}R^{J=3M}_{E;2} \\ &+w_3\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_1u_0u_0}R^{J=3M}_{E;1} + +w_4\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_1u_0u_0}R^{J=3M}_{E;2} \\ &+w_5\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_1u_0}R^{J=3M}_{E;1} + w_6\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_1u_0}R^{J=3M}_{E;2} \\ &+w_7\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_0u_1}R^{J=3M}_{E;1} + w_8\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_0u_1}R^{J=3M}_{E;2}, \end{aligned} \tag{660}$$

gdzie $\Gamma_1 = A_1,\ B_1$.

(e) **Stan 5⁻** w zależności od wyboru $\Gamma_1 = A_1,\ B_1$ ma postać:

$$\begin{aligned} &\Psi^{5(-)M}_{\Gamma_1A_1E} = \\ &= w_1\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_1u_0u_0u_0}R^{J=5M}_{E;1} + w_2\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_1u_0u_0u_0}R^{J=5M}_{E;2} \\ &+w_3\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_1u_0u_0u_0}R^{J=5M}_{E;3} + w_4\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_1u_0u_0}R^{J=5M}_{E;1} \\ &+w_5\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_1u_0u_0}R^{J=5M}_{E;2} + w_6\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_1u_0u_0}R^{J=5M}_{E;3} \\ &+w_7\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_1u_0}R^{J=5M}_{E;1} + w_8\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_1u_0}R^{J=5M}_{E;2} \\ &+w_9\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_1u_0}R^{J=5M}_{E;3} + w_{10}\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_0u_1}R^{J=5M}_{E;1} \\ &+w_{11}\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_0u_1}R^{J=5M}_{E;2} + w_{12}\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_0u_1}R^{J=5M}_{E;3}. \end{aligned} \tag{661}$$

(f) **Stan 2⁻** można zapisać na dwa sposoby:

$$\Psi^{2(-)M}_{\Gamma_1 A_1 E}(\{\alpha_{2\mu}\},\{\alpha_{3\nu'}\},\Omega) =$$
$$= w_1\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_1u_0u_0u_0}R^{J=2M}_{E} + w_2\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_1u_0u_0}R^{J=2M}_{E}$$
$$+w_3\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_1u_0}R^{J=2M}_{E} + w_4\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_0u_1}R^{J=2M}_{E}, \quad (662)$$

gdzie $\Gamma_1 = A_1,\ B_1$.

(g) **Stan 4⁻** w zależności od wyboru nieprzywiedlnej reprezentacji $\Gamma_1 = A_1,\ B_1$ ma postać:

$$\Psi^{4(-)M}_{\Gamma_1 A_1 E}(\{\alpha_{2\mu}\},\{\alpha_{3\nu'}\},\Omega)$$
$$= w_1\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_1u_0u_0u_0}R^{J=4M}_{E;1} + w_2\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_1u_0u_0u_0}R^{J=4M}_{E;2}$$
$$+w_3\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_1u_0u_0}R^{J=4M}_{E;1} + w_4\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_1u_0u_0}R^{J=4M}_{E;2}$$
$$+w_5\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_1u_0}R^{J=4M}_{E;1} + w_6\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_1u_0}R^{J=4M}_{E;2}$$
$$+w_7\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_0u_1}R^{J=4M}_{E;1} + w_8\psi^{\Gamma_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3;u_0u_0u_0u_1}R^{J=4M}_{E;2}. \quad (663)$$

Indeks dolny $u_iu_j,\ i.j = 0,1$ przy funkcji wibracyjnej opisującej część kwadrupolową w paśmie kwadrupolowym oznacza, że funkcja bazowa $\psi^{\Gamma_1}_{vib2;u_iu_j}$ powstała z rzutu iloczynu dwóch funkcji oscylatora harmonicznego $u_i(\eta_2;\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20})u_j(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22})$ na reprezentację Γ_1. Ze względu na budowę funkcji, omawianej we wcześniejszym rozdziale, wibracyjna część oktupolowa dla tego pasma $\psi^{(+);\Gamma_2}_{vib3}$ nie ma wzbudzeń i jest funkcją postaci $u_0(\eta_3;\alpha_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_2;\alpha'_{31})$ $u_0(\sqrt{2}\eta_2;\alpha'_{32})u_0(\sqrt{2}\eta_2;\alpha'_{33})$.

Ponieważ pełny opis funkcji jest dość długi zatem do określenia funkcji użyte są jedynie reprezentacje do których należą poszczególne wektory bazowe opisujące części: wibracyjną kwadrupolową Γ_1, wibracyjną oktupolową Γ_2 oraz rotacyjną Γ_3. Dodatkowo podana jest informacja z jakiego rzutu powstała kwadrupolowa część wibracyjna, tj. $(\Gamma_1\!:u_iu_j)\Gamma_2\Gamma_3,\ i,j = 0,1$.

W paśmie oktupolowym funkcja bazowa kwadrupolowej części wibracyjnej pochodzi z rzutu $u_0(\eta_2;\alpha_{20}-\mathring{\alpha}_{20})u_0(\sqrt{2}\eta_2;\alpha_{22}-\mathring{\alpha}_{22})$ na reprezentację $\Gamma_1 = A_1, B_1$, część oktupolowa może pochodzić z czterech funkcji $u_i(\eta_3;\alpha_{30}-\mathring{\alpha}_{30})u_j(\sqrt{2}\eta_2;\alpha'_{31}-\mathring{\alpha}'_{31})u_k(\sqrt{2}\eta_2;\alpha'_{32}-\mathring{\alpha}'_{32})u_l(\sqrt{2}\eta_2;\alpha'_{33}-\mathring{\alpha}'_{33}),\ \ i,j,k,l = 0,1,\ \ i+j+k+l = 1$ zrzutowanych na reprezentację E oraz funkcji rotacyjnej zrzutowanej na $\Gamma_3 = E$. Do rozróżnienia iloczynów trzech funkcji bazowych używane są analogiczne oznaczenia jak dla pasma kwadrupolowego, tj. $\Gamma_1(\Gamma_2 : u_iu_ju_ku_l)\Gamma_3$, gdzie $\Gamma_n,\ n = 1,2,3$ oznaczają nieprzywiedlne

reprezentacje, a $u_i u_j u_k u_l$ określają rodzinę funkcji do jakiej należy oktupolowy wektor bazowy.

E.1 Model o parametrach dopasowanych tylko do pierwszych dwóch pasm

W przedstawionym poniżej modelu mamy trzy schematy najlepiej odtwarzające wartości eksperymentalne [5, 6]. Każdy ze schematów opisany jest parametrami, które są identyczne dla każdego z trzech rozważanych pasm energetycznych. Trzeba jednak pamiętać, że wartości parametrów zostały określone do dwóch pierwszych pasm, a funkcje stanów trzeciego pasma mają z góry włożone ich wartości.

Wartości prawdopodobieństw odpowiadającym z jakim dany iloczyn trzech funkcji bazowych wchodzi w skład stanu przedstawione są tabelach umieszczonych po opisie każdego ze schematu. Wielkość otrzymana z odjęcia otrzymanego prawdopodobieństwa dotyczy iloczynów ortogonalnych do danego.

Schemat 1. posiada następujące dwa pierwsze pasma:

$$\begin{aligned} &0^+ : \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(+);A_1}R_{A_1}^{JM}, \qquad 3^- : \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E}R_{E}^{JM},\\ &2^+ : \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(+);A_1}R_{A_1}^{JM}, \qquad 5^- : \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E}R_{E}^{JM}.\\ &4^+ : \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(+);A_1}R_{A_1}^{JM}, \end{aligned} \tag{664}$$

Dla tak wybranych stanów mamy następujące wartości parametrów wyznaczonych metodą najmniejszych kwadratów:

$$\begin{aligned} \eta_2 &= 0{,}995, \quad \eta_3 = 12{,}820,\\ \mathring{\alpha}_{30} &= 0{,}109, \quad \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}082,\\ \mathring{\alpha}'_{32} &= 0{,}131, \quad \mathring{\alpha}'_{33} = 0{,}110. \end{aligned} \tag{665}$$

Wartości przejść $B(E2)$ oraz $B(E1)$ są następujące:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^+ \to 2^+) &= 263 W.u,\\ B(E2\colon 2^+ \to 0^+) &= 187 W.u,\\ B(E2\colon 5^- \to 3^-) &= 293 W.u, \end{aligned} \tag{666}$$

oraz

$$\begin{aligned} B(E1\colon 5^- \to 4^+) &= 1{,}188 \times 10^{-3} W.u,\\ B(E1\colon 3^- \to 4^+) &= 0{,}129 \times 10^{-3} W.u,\\ B(E1\colon 3^- \to 2^+) &= 1{,}097 \times 10^{-3} W.u. \end{aligned} \tag{667}$$

Jak widać udało się znaleźć parametry, które dokładnie odtwarzają przejścia $B(E2)$ dla dwóch pierwszych pasm oraz dają dość dobre wartości $B(E1)$.

Trzecie pasmo może mieć następującą postać:

$$\begin{aligned} 2^-:&\quad \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^E_{JM},\\ 4^-:&\quad \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^E_{JM} \end{aligned} \tag{668}$$

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 723{,}999 W.u,\\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}327\times 10^{-3} W.u,\\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}946\times 10^{-4} W.u; \end{aligned} \tag{669}$$

lub

$$\begin{aligned} 2^-:&\quad \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^E_{JM},\\ 4^-:&\quad \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^E_{JM} \end{aligned} \tag{670}$$

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 724{,}000 W.u,\\ B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}229\times 10^{-1} W.u,\\ B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}148\times 10^{-3} W.u. \end{aligned} \tag{671}$$

Dla przedstawionego pasma jedynie pierwszy sposób jego opisania najlepiej odpowiada wartości eksperymentalnej.

Rozkład prawdopodobieństwa dla poszczególnych stanów jest następujący:

(1) Stan 2^+:

funkcja bazowa	$(A_1\colon u_0u_0)A_1A_1$	$(A_1\colon u_1u_0)A_1A_1$	$(A_1\colon u_0u_1)A_1A_1$
prawdop.	0,4626	0,6846	0,4106

Współczynniki $w_i,\ i = 1, 2, 3$:

$$w_1 = 0{,}372,\quad w_2 = 0{,}125,\quad w_3 = -0{,}303, \tag{672}$$

Największy wkład do tego stanu wnosi funkcja $(A_1\colon u_1u_0)A_1A_1$, czyli funkcja, która posiada wzbudzenie jednofononowe.

(2) Stan 4^+:

funkcja bazowa	$(A_1\colon u_0u_0)A_1A_{1;1}$	$(A_1\colon u_1u_0)A_1A_{1;1}$	$(A_1\colon u_0u_1)A_1A_{1;1}$
prawdop.	0,0457	0,8350	0,3763

funkcja bazowa	$(A_1\!:u_0u_0)A_1A_{1;2}$	$(A_1\!:u_1u_0)A_1A_{1;2}$	$(A_1\!:u_0u_1)A_1A_{1;2}$
prawdop.	0,0577	0,6594	0,4027

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 6$:

$$w_1 = -0{,}106, \quad w_2 = -0{,}450, \quad w_3 = 0{,}186, \tag{673}$$

$$w_4 = -0{,}082, \quad w_5 = 0{,}035, \quad w_6 = 0{,}161. \tag{674}$$

W przypadku stanu 4^+ największy wkład daje funkcja jednofononowa oznaczona jako $(A_1\!:u_1u_0)A_1A_{1;1}$.

(3) Stan 3^-:

funkcja bazowa	$B_1(E\!:u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	$B_1(E\!:u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,3062	0,1696

funkcja bazowa	$B_1(E\!:u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$	$B_1(E\!:u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,0912	0,0049
funkcja bazowa	$B_1(E\!:u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$B_1(E\!:u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,0716	$1{,}3441 \times 10^{-5}$
funkcja bazowa	$B_1(E\!:u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$	$B_1(E\!:u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$
prawdop.	0,0469	0,3059

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 8$:

$$w_1 = 0{,}643, \quad w_2 = 0{,}478, \quad w_3 = 0{,}353, \quad w_4 = 0{,}089, \tag{675}$$
$$w_5 = -0{,}312, \quad w_6 = 0{,}003, \quad w_7 = 0{,}256, \quad w_8 = 0{,}642.$$

Do stanu 3^- największy wkład dają dwie funkcje $B_1(E\!:u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$ oraz $B_1(E\!:u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$, którym odpowiada odpowiednio wzbudzenie występujące przy zmiennej $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$ oraz $\alpha_{30}, \alpha'_{32}, \alpha'_{33}$.

(4) Stan 5^-:

funkcja bazowa	$B_1(E\!:u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	$B_1(E\!:u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,0052	0,0267

funkcja bazowa	$B_1(E\!:u_1u_0u_0u_0)E_{;3}$	$B_1(E\!:u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$
prawdop.	0,1345	0,1218
funkcja bazowa	$B_1(E\!:u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$	$B_1(E\!:u_0u_1u_0u_0)E_{;3}$
prawdop.	0,0720	0,0520
funkcja bazowa	$B_1(E\!:u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$B_1(E\!:u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,0314	0,0045

funkcja bazowa	$B_1(E: u_0u_0u_1u_0)E_{;3}$	$B_1(E: u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$
prawdop.	0,0095	0,2198

funkcja bazowa	$B_1(E: u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$	$B_1(E: u_0u_0u_0u_1)E_{;3}$
prawdop.	0,1258	0,1953

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 12$:

$$\begin{gathered} w_1 = -0{,}098, \quad w_2 = 0{,}221, \quad w_3 = 0{,}495, \quad w_4 = -0{,}463, \\ w_5 = 0{,}368, \quad w_6 = 0{,}315, \quad w_7 = 0{,}329, \quad w_8 = -0{,}091, \\ w_9 = -0{,}134, \quad w_{10} = 0{,}627, \quad w_{11} = 0{,}483, \quad w_{12} = 0{,}600. \end{gathered} \tag{676}$$

Dla stanu 5^- największy wkład daje funkcja oznaczona jako $B_1(E: u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$ oraz $B_1(E: u_0u_0u_0u_1)E_{;3}$. Co oznacza, że wzbudzenie dla obu funkcji jest identyczne i występuje przy zmiennych $\alpha_{30}, \alpha'_{32}, \alpha'_{33}$. Funkcje różnią się jedynie wyborem jednej z reprezentacji opisującej ruch rotacyjny.

(5) Dla trzeciego pasma mającego postać:

$$\begin{aligned} 4^- &: \ \psi^{B_1}_{vib2} \psi^{(-);E}_{vib3} R^E_{JM} \\ 2^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2} \psi^{(-);E}_{vib3} R^E_{JM} \end{aligned} \tag{677}$$

rozkład prawdopodobieństwa dla stanu 2^- jest następujący:

funkcja bazowa	$A_1(E: u_1u_0u_0u_0)E$	$A_1(E: u_0u_1u_0u_0)E$
prawdop.	0,8866	0,0052

funkcja bazowa	$A_1(E: u_0u_0u_1u_0)E$	$A_1(E: u_0u_0u_0u_1)E$
prawdop.	0,0875	0,0228

Współczynniki $w_i,\ i = 1, 2, 3, 4$:

$$w_1 = 1{,}341, \quad w_2 = -0{,}100, \quad w_3 = 0{,}417, \quad w_4 = 0{,}214. \tag{678}$$

Dominujący wkład dla tego stanu daje funkcja $A_1(E: u_1u_0u_0u_0)E$, dla której wzbudzenia występują przy zmiennych $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$.

Dla stanu 4^- został otrzymany następujący rozkład prawdopodobieństwa:

funkcja bazowa	$B_1(E: u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	$B_1(E: u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,7118	0,0443

funkcja bazowa	$B_1(E: u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$	$B_1(E: u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,0008	0,0348

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,1044	0,0035

funkcja bazowa c.d.	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$
prawdop.	0,0600	0,0435

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 8$:

$$w_1 = 1{,}913, \quad w_2 = -0{,}477, \quad w_3 = -0{,}057, \quad w_4 = -0{,}418, \quad w_5 = 0{,}727, \quad w_6 = -0{,}132, \quad w_7 = 0{,}556, \quad w_8 = 0{,}469. \tag{679}$$

Również dla tego stanu funkcja dająca największy wkład $B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$ posiada wzbudzenia przy zmiennych $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$.

(6) Dla trzeciego pasma, gdzie:

$$\begin{aligned} 4^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^E_{JM} \\ 2^- &: \ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^E_{JM} \end{aligned} \tag{680}$$

prawdopodobieństwa dla stanu 2^- wynoszą:

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$	$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E$
prawdop.	0,7136	0,0026

funkcja bazowa c.d.	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E$	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E$
prawdop.	0,2202	0,0660

Współczynniki $w_i,\ i = 1, 2, 3, 4$:

$$w_1 = -0{,}849, \quad w_2 = 0{,}054, \quad w_3 = -0{,}470, \quad w_4 = 0{,}259. \tag{681}$$

Dla stanu 4^- zostały otrzymane następujące wartości prawdopodobieństwa:

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,4054	0,1320

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,0328	0,1578

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,1227	0,0385

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$
prawdop.	0,1114	$1{,}5700 \times 10^{-5}$

Współczynniki $w_i,\ i = 1,\ldots,8$:

$$w_1 = -1{,}265, \quad w_2 = 0{,}722, \quad w_3 = 0{,}368, \quad w_4 = -0{,}791, \qquad (682)$$
$$w_5 = -0{,}693, \quad w_6 = 0{,}388, \quad w_7 = 0{,}669, \quad w_8 = -0{,}0021.$$

Dla powyższego wyboru trzeciego pasma funkcje, które dają największy wkład do obu stanów mają wzbudzenie przy zmiennych $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$. Dla stanu 2^- jest to funkcja oznaczona jako $B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$, a dla 4^- jest to $A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$.

Schemat 2. zbudowany jest z pasm energetycznych opisanych przez stany:

$$\begin{aligned} 0^+ &: \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{JM}_{A_1}, \qquad 3^- : \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \\ 2^+ &: \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{JM}_{A_1}, \qquad 5^- : \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \\ 4^+ &: \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{JM}_{A_1}, \end{aligned} \qquad (683)$$

gdzie trzecie pasmo ma postać:

$$\begin{aligned} 2^- &\quad \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{E}_{JM}, \\ 4^- &\quad \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{E}_{JM} \end{aligned} \qquad (684)$$

lub

$$\begin{aligned} 2^- &\quad \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{E}_{JM}, \\ 4^- &\quad \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{E}_{JM}. \end{aligned} \qquad (685)$$

Dla tego schematu uzyskujemy następujące parametry:

$$\begin{aligned} \eta_2 = 1{,}100, &\quad \eta_3 = 12{,}461, \\ \mathring{\alpha}_{30} = 0{,}094, &\quad \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}093, \\ \mathring{\alpha}'_{32} = 0{,}131, &\quad \mathring{\alpha}'_{33} = 0{,}106, \end{aligned} \qquad (686)$$

dla których $B(E2)$ oraz $B(E1)$ wynoszą:

$$\begin{aligned} B(E2\colon 4^+ \to 2^+) &= 262{,}999 W.u, \\ B(E2\colon 2^+ \to 0^+) &= 187{,}000 W.u, \\ B(E2\colon 5^- \to 3^-) &= 293{,}000 W.u, \end{aligned} \qquad (687)$$

oraz

$$\begin{aligned} B(E1\colon 5^- \to 4^+) &= 0{,}219 \times 10^{-3} W.u, \\ B(E1\colon 3^- \to 4^+) &= 0{,}299 \times 10^{-3} W.u, \\ B(E1\colon 3^- \to 2^+) &= 1{,}787 \times 10^{-3} W.u. \end{aligned} \qquad (688)$$

Otrzymane wartości przejść międzypasmowych również są bliskie wartościom otrzymanym w eksperymencie.

Rozkład prawdopodobieństwa dla poszczególnych stanów jest następujący:

(1) Stan 2^+:

funkcja bazowa	$(A_1\!:u_0u_0)A_1A_1$	$(A_1\!:u_1u_0)A_1A_1$	$(A_1\!:u_0u_1)A_1A_1$
prawdop.	0,8762	0,0023	0,2144

Współczynniki $w_i,\ i = 1, 2, 3$:

$$w_1 = 0{,}182, \quad w_2 = -0{,}007, \quad w_3 = 0{,}078. \tag{689}$$

Dla stanu 2^+ największy wkład daje funkcja zerofononowa oznaczona jako $(A_1\!:u_0u_0)A_1A_1$.

(2) Stan 4^+:

funkcja bazowa	$(A_1\!:u_0u_0)A_1A_{1;1}$	$(A_1\!:u_1u_0)A_1A_{1;1}$
prawdop.	0,0323	0,4433

funkcja bazowa	$(A_1\!:u_0u_1)A_1A_{1;1}$	$(A_1\!:u_0u_0)A_1A_{1;2}$
prawdop.	0,6753	0,0014

funkcja bazowa	$(A_1\!:u_1u_0)A_1A_{1;2}$	$(A_1\!:u_0u_1)A_1A_{1;2}$
prawdop.	0,4401	0,7496

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 6$:

$$\begin{aligned} w_1 = -0{,}301, \quad w_2 = -0{,}102, \quad w_3 = 0{,}435, \\ w_4 = -0{,}162, \quad w_5 = -0{,}139, \quad w_6 = -0{,}289. \end{aligned} \tag{690}$$

W przypadku stanu 4^+ największy wkład daje funkcja jednofononowa oznaczona jako $(A_1\!:u_0u_1)A_1A_{1;2}$.

(3) Stan 3^-:

funkcja bazowa	$B_1(E\!:u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	$B_1(E\!:u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,1557	0,1314

funkcja bazowa	$B_1(E\!:u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$	$B_1(E\!:u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,2640	0,0094

funkcja bazowa	$B_1(E\!:u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$B_1(E\!:u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,1193	0,0148

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$
prawdop.	0,0687	0,2293

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 8$:

$$w_1 = 0{,}478,\quad w_2 = 0{,}438,\quad w_3 = 0{,}624,\quad w_4 = 0{,}125,$$
$$w_5 = -0{,}419,\quad w_6 = -0{,}150,\quad w_7 = 0{,}324,\quad w_8 = 0{,}579. \tag{691}$$

Dla tego stanu największy wkład dają dwie funkcje: $B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$ oraz $B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$, dla których wzbudzenie występuje odpowiednio przy zmiennych $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{32}$ i $\alpha_{30}, \alpha'_{32}, \alpha'_{33}$.

(4) Stan 5^-:

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,1156	0,0961

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;3}$	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$
prawdop.	0,0519	0,1079

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;3}$
prawdop.	0,1645	$4{,}7893 \times 10^{-6}$

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,3212	0,0202

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;3}$	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$
prawdop.	0,0220	0,0595

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;3}$
prawdop.	0,0254	0,0124

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 12$:

$$w_1 = -0{,}475,\quad w_2 = 0{,}430,\quad w_3 = 0{,}316,\quad w_4 = -0{,}450,$$
$$w_5 = 0{,}564,\quad w_6 = -0{,}001,\quad w_7 = 0{,}787,\quad w_8 = -0{,}199,$$
$$w_9 = -0{,}207,\quad w_{10} = 0{,}331,\quad w_{11} = 0{,}228,\quad w_{12} = 0{,}154. \tag{692}$$

Dla stanu 5^- największy wkład pochodzi z funkcji $A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$, dla której wzbudzenie występuje przy zmniennych $\alpha'_{31}, \alpha'_{32}, \alpha'_{33}$.

(5) Dla trzeciego pasma opisanego przez stany:

$$4^- :\ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^E_{JM},$$
$$2^- :\ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^E_{JM}, \tag{693}$$

dla których mamy:

$$B(E2\colon 4^- \to 2^-) = 724{,}000 W.u,$$
$$B(E1\colon 2^- \to 2^+) = 0{,}240 \times 10^{-1} W.u,$$
$$B(E1\colon 4^- \to 4^+) = 0{,}722 \times 10^{-3} W.u. \qquad (694)$$

Dla stanu 2^- mamy:

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E$
prawdop.	0,7866	0,0307

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E$	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E$
prawdop.	0,1228	0,0652

Współczynniki $w_i,\ i = 1,2,3,4$:

$$w_1 = 2{,}011, \quad w_2 = -0{,}391, \quad w_3 = 0{,}783, \quad w_4 = 0{,}576. \qquad (695)$$

Stan 4^- ma następujący rozkład prawdopodobieństwa:

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,5916	0,2128

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,0160	0,0011

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,0985	0,0195

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,0985	0,0195

funkcja bazowa c.d.	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$
prawdop.	0,0643	0,0108

Współczynniki $w_i,\ i = 1,\ldots,8$:

$$w_1 = 2{,}122, \quad w_2 = -1{,}273, \quad w_3 = -0{,}340, \quad w_4 = 0{,}092, \qquad (696)$$
$$w_5 = 0{,}854, \quad w_6 = -0{,}378, \quad w_7 = 0{,}697, \quad w_8 = 0{,}092.$$

Dla tak wybranego trzeciego pasma największy wkład do stanu 2^- daje funkcja $A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$, a dla stanu 4^- funkcja $B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$. W obu przypadkach wzbudzenie występuje przy zmiennych $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$.

(6) Dla trzeciego pasma mającego postać:

$$
\begin{aligned}
4^- &: \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^E_{JM},\\
2^- &: \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^E_{JM},
\end{aligned} \tag{697}
$$

dla których wartości $B(E2)$ i $B(E1)$ wynoszą:

$$
\begin{aligned}
B(E2\colon 4^- \to 2^-) &= 724{,}000 W.u,\\
B(E1\colon 2^- \to 2^+) &= 0{,}687 \times 10^{-2} W.u,\\
B(E1\colon 4^- \to 4^+) &= 0{,}515 \times 10^{-4} W.u;
\end{aligned} \tag{698}
$$

Stan 2^- ma następujący rozkład prawdopodobieństwa:

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$	$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E$
prawdop.	0,6525	0,0417

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E$	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E$
prawdop.	0,3108	0,0008

Współczynniki $w_i,\ i = 1, 2, 3, 4$:

$$
w_1 = -1{,}839, \quad w_2 = 0{,}468, \quad w_3 = -1{,}263, \quad w_4 = 0{,}072. \tag{699}
$$

Dla funkcji opisujących stan 4^- zostały otrzymane następujące wartości prawdopodobieństw:

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,6182	0,0672

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,0139	0,0171

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,2061	0,0808

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$
prawdop.	0,0004	0,0021

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 8$:

$$
\begin{aligned}
&w_1 = -2{,}316, \quad w_2 = 0{,}761, \quad w_3 = 0{,}349, \quad w_4 = -0{,}386,\\
&w_5 = -1{,}327, \quad w_6 = 0{,}836, \quad w_7 = 0{,}064, \quad w_8 = 0{,}129.
\end{aligned} \tag{700}
$$

Analogicznie jak dla wcześniejszego trzeciego pasma funkcje dające największy wkład do stanów mają wzbudzenia przy zmiennych $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$. I są to funkcje dla stanu 2^-: $B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$, a dla 4^-: $A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$.

W przypadku **schematu 3.** mamy następujące stany dla rozważanych pasm energetycznych:

$$\begin{aligned}
&0^+ : \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3} R^{JM}_{A_1}, \qquad 3^- : \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_{E},\\
&2^+ : \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3} R^{JM}_{B_1}, \qquad 5^- : \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_{E},\\
&4^+ : \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3} R^{JM}_{A_1},
\end{aligned} \tag{701}$$

dla których przejścia wewnątrzpasmowe mają wartości zgodne z eksperymentalnymi:

$$\begin{aligned}
B(E2\colon 4^+ \to 2^+) &= 263 W.u,\\
B(E2\colon 2^+ \to 0^+) &= 187 W.u,\\
B(E2\colon 5^- \to 3^-) &= 293 W.u.
\end{aligned} \tag{702}$$

W tym przypadku mamy kilka możliwych zbiorów parametrów:

(i) Pierwszy zbiór wybranych parametrów:

$$\begin{aligned}
\eta_2 &= 10{,}641 \quad \eta_3 = 13{,}103,\\
\mathring{\alpha}_{30} &= 0{,}111 \quad \mathring{\alpha}_{31} = 0{,}099,\\
\mathring{\alpha}_{32} &= 0{,}108 \quad \mathring{\alpha}_{33} = 0{,}110,
\end{aligned} \tag{703}$$

daje następujące wartości $B(E1)$, które są zbliżone do otrzymanych w eksperymencie:

$$\begin{aligned}
B(E1\colon 5^- \to 4^+) &= 0{,}146 \times 10^{-3} W.u,\\
B(E1\colon 3^- \to 4^+) &= 0{,}212 \times 10^{-3} W.u,\\
B(E1\colon 3^- \to 2^+) &= 0{,}262 \times 10^{-4} W.u.
\end{aligned} \tag{704}$$

(ii) Drugim zbiorem otrzymanych parametrów jest:

$$\begin{aligned}
\eta_2 &= 9{,}902 \quad \eta_3 = 13{,}792,\\
\mathring{\alpha}_{30} &= 0{,}106 \quad \mathring{\alpha}_{31} = 0{,}099,\\
\mathring{\alpha}_{32} &= 0{,}090 \quad \mathring{\alpha}_{33} = 0{,}123.
\end{aligned} \tag{705}$$

Dla powyższych wartości otrzymujemy zgodność co do rzędu z wartościami eksperymentalnymi:

$$\begin{aligned}
B(E1\colon 5^- \to 4^+) &= 0{,}168 \times 10^{-3} W.u,\\
B(E1\colon 3^- \to 4^+) &= 0{,}103 \times 10^{-3} W.u,\\
B(E1\colon 3^- \to 2^+) &= 0{,}165 \times 10^{-3} W.u.
\end{aligned} \tag{706}$$

(iii) Trzeci zbiór parametrów opisujących pierwsze pasma ma postać:

$$\begin{aligned} \eta_2 &= 10{,}655 \quad & \eta_3 &= 6{,}932, \\ \mathring{\alpha}_{30} &= -0{,}034 \quad & \mathring{\alpha}_{31} &= -0{,}068, \\ \mathring{\alpha}_{32} &= -0{,}415 \quad & \mathring{\alpha}_{33} &= -0{,}080. \end{aligned} \tag{707}$$

Dla paramatrów (707) mamy następujące zredukowane prawdopodobieństwa przejść dipolowych:

$$\begin{aligned} B(E1\colon 5^- \to 4^+) &= 0{,}326 \times 10^{-3} W.u, \\ B(E1\colon 3^- \to 4^+) &= 0{,}380 \times 10^{-3} W.u, \\ B(E1\colon 3^- \to 2^+) &= 0{,}666 \times 10^{-3} W.u. \end{aligned} \tag{708}$$

Podobnie jak dla poprzedniego zbioru parametrów otrzymujemy zgodność co do rzędu z wartościami eksperymentalnymi.

Dla schematu 3. trzecie pasmo obejmuje cztery możliwe kombinacje:

$$\begin{aligned} 2^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^E_{JM},\ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^E_{JM}, \\ 4^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^E_{JM},\ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^E_{JM}, \end{aligned} \tag{709}$$

dla których wartości przejść wewnątrz i międzypasmowych wynoszą:

(a) dla $2^-, 4^-$: $\psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^E_{JM}$ otrzymujemy:

	$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$
$B(E2\colon 4^- \to 2^-)$	76,179	77,828	75,671
$B(E1\colon 4^- \to 4^+)$	$0{,}104\times10^{-3}$	$0{,}146\times10^{-9}$	$0{,}776\times10^{-7}$
$B(E1\colon 2^- \to 2^+)$	$0{,}216\times10^{-10}$	$0{,}250\times10^{-9}$	$0{,}113\times10^{-3}$

wartości $B(E1)$ i $B(E2)$ podane są w jednostce $W.u$,

(b) dla 2^- : $\psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E$ oraz 4^- : $\psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E$ dostajemy:

	$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$
$B(E2\colon 4^- \to 2^-)$	141,308	141,308	141,308
$B(E1\colon 4^- \to 4^+)$	$0{,}686 \times 10^{-3}$	$0{,}197 \times 10^{-9}$	$0{,}610 \times 10^{-7}$
$B(E1\colon 2^- \to 2^+)$	$0{,}160 \times 10^{-2}$	$0{,}457 \times 10^{-9}$	$0{,}960 \times 10^{-7}$

wartości $B(E1)$ i $B(E2)$ podane są w jednostce $W.u$,

(c) dla 2^- : $\psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(-);E}R_E^{JM}$ i 4^- : $\psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E}R_E^{JM}$ uzyskujemy:

	$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$
$B(E2\colon 4^- \to 2^-)$	141,308	141,308	141,308
$B(E1\colon 4^- \to 4^+)$	$0{,}169 \times 10^{-8}$	$0{,}120 \times 10^{-9}$	$0{,}756 \times 10^{-9}$
$B(E1\colon 2^- \to 2^+)$	$0{,}640 \times 10^{-8}$	$0{,}136 \times 10^{-8}$	$0{,}242 \times 10^{-8}$

wartości $B(E1)$ i $B(E2)$ podane są w jednostce $W.u$,

(d) dla $2^-, 4^-$: $\psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E}R_E^{JM}$ otrzymujemy:

	$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$
$B(E2\colon 4^- \to 2^-)$	89,463	91,235	87,769
$B(E1\colon 4^- \to 4^+)$	$0{,}398 \times 10^{-9}$	$0{,}754 \times 10^{-10}$	$0{,}154 \times 10^{-4}$
$B(E1\colon 2^- \to 2^+)$	$0{,}246 \times 10^{-3}$	$0{,}213 \times 10^{-7}$	$0{,}152 \times 10^{-3}$

wartości $B(E1)$ i $B(E2)$ podane są w jednostce $W.u.$

Rozkład prawdopodobieństwa dla poszczególnych stanów jest następujący:

(1) Dla stanu 2^+ ma on wartości:

funkcja bazowa	$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$
$(B_1\colon u_0u_0)A_1B_1$	0,9688	0,9448	0,9316
$(B_1\colon u_1u_0)A_1B_1$	0,0277	0,0542	0,0685
$(B_1\colon u_0u_1)A_1B_1$	0,0036	0,0011	0,0002

	współczynniki dla stanu 2^+
$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$w_1 = -0{,}580, \quad w_2 = -0{,}098, \quad w_3 = 0{,}035$
$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$w_1 = 0{,}773, \quad w_2 = 0{,}185, \quad w_3 = -0{,}026$
$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$	$w_1 = -1{,}346, \quad w_2 = -0{,}364, \quad w_3 = -0{,}019$

Dla każdego wyboru parametrów największy wkład daje funkcja zerofononowa $(B_1\colon u_0u_0)A_1B_1$.

(2) Dla stanu 4^+ wynosi:

funkcja bazowa	$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$
$(A_1 \colon u_0 u_0) A_1 A_{1;1}$	0,8617	0,6070	0,4358
$(A_1 \colon u_1 u_0) A_1 A_{1;1}$	0,0003	0,3273	0,1412
$(A_1 \colon u_0 u_1) A_1 A_{1;1}$	0,0410	0,0026	0,0294
$(A_1 \colon u_0 u_0) A_1 A_{1;2}$	0,1855	0,1807	0,0001
$(A_1 \colon u_1 u_0) A_1 A_{1;2}$	0,0392	0,0567	0,0007
$(A_1 \colon u_0 u_1) A_1 A_{1;2}$	0,0026	0,0194	0,1094

	współczynniki dla stanu 4^+
$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$w_1 = 1{,}374,\quad w_2 = 0{,}274,\quad w_3 = -0{,}352,$ $w_4 = 0{,}248,\quad w_5 = 0{,}425,\quad w_6 = -0{,}142$
$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$w_1 = 0{,}910,\quad w_2 = 0{,}745,\quad w_3 = 0{,}232$ $w_4 = 0{,}066,\quad w_5 = 0{,}177,\quad w_6 = 0{,}293$
$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$	$w_1 = -2{,}354,\quad w_2 = -1{,}273,\quad w_3 = 0{,}088$ $w_4 = -1{,}425,\quad w_5 = -0{,}697,\quad w_6 = 0{,}807$

Dla tego stanu również największy wkład daje funkcja zerofononowa $(A_1 \colon u_0 u_0) A_1 A_{1;1}$.

(3) Dla stanu 3^- mamy:

funkcja bazowa	$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$
$A_1(E \colon u_1 u_0 u_0 u_0) E_{;1}$	0,1663	0,0011	0,0844
$A_1(E \colon u_1 u_0 u_0 u_0) E_{;2}$	0,2545	0,1647	0,0805
$A_1(E \colon u_0 u_1 u_0 u_0) E_{;1}$	0,2571	0,4173	0,4472
$A_1(E \colon u_0 u_1 u_0 u_0) E_{;2}$	0,0639	0,0094	0,0727
$A_1(E \colon u_0 u_0 u_1 u_0) E_{;1}$	0,0030	0,2448	0,0388
$A_1(E \colon u_0 u_0 u_1 u_0) E_{;2}$	0,0237	0,1165	0,1571
$A_1(E \colon u_0 u_0 u_0 u_1) E_{;1}$	0,2208	0,1927	0,0929
$A_1(E \colon u_0 u_0 u_0 u_1) E_{;2}$	0,0117	0,0005	0,0354

	współczynniki dla stanu 3^-
$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$w_1 = 0{,}519, \quad w_2 = -0{,}641, \quad w_3 = -0{,}649,$ $w_4 = 0{,}322, \quad w_5 = 0{,}063, \quad w_6 = -0{,}188,$ $w_7 = -0{,}602, \quad w_8 = -0{,}137$
$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$w_1 = -0{,}047, \quad w_2 = 0{,}586, \quad w_3 = 0{,}809$ $w_4 = 0{,}148, \quad w_5 = -0{,}714, \quad w_6 = 0{,}493$ $w_7 = -0{,}333, \quad w_8 = 0{,}023$
$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$	$w_1 = 0{,}525, \quad w_2 = -0{,}502, \quad w_3 = -1{,}231$ $w_4 = 0{,}496, \quad w_5 = 0{,}348, \quad w_6 = -0{,}716,$ $w_7 = -0{,}562, \quad w_8 = -0{,}346$

Dla tego stanu w zależności od wyboru parametrów majwiększy wkład dają następujące funkcje: dla $\eta_2 = 10{,}6410, \eta_3 = 13{,}1026$ są to $A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$, $A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$ oraz $A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$, dla krórych wzbudzenia pojawiają się odpowiednio przy $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{32}$, $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$ i $\alpha_{30}, \alpha'_{32}, \alpha'_{33}$. Dla pozostałych dwóch zbiorów parametrów największy wkład daje funkcja $A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$ mająca wzbudzenie przy zmiennych $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{32}$.

(4) Dla stanu 5^- otrzymujemy:

funkcja bazowa	$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$
$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	0,1290	0,0143	0,0938
$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$	0,2299	0,2116	0,2200
$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;3}$	0,1028	0,1857	0,1909
$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$	0,1546	0,3155	0,2677
$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$	0,0813	0,0015	0,0063
$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;3}$	0,0545	$3{,}0342 \times 10^{-6}$	0,0294
$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	0,0090	0,1679	0,0060
$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$	0,0285	0,0231	0,0061
$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;3}$	0,0947	0,0482	0,1587
$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$	0,0495	0,1142	0,0314
$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$	0,0033	0,0027	0,0003
$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;3}$	0,0672	0,0098	0,0019

	współczynniki dla stanu 5^-
$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$w_1 = 0{,}567,\quad w_2 = -0{,}756,\quad w_3 = 0{,}501,$ $w_4 = -0{,}624,\quad w_5 = 0{,}452,\quad w_6 = -0{,}371,$ $w_7 = 0{,}143,\quad w_8 = -0{,}257,\quad w_9 = 0{,}481,$ $w_{10} = -0{,}355,\quad w_{11} = 0{,}092,\quad w_{12} = -0{,}412,$
$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$w_1 = 0{,}253,\quad w_2 = 0{,}976,\quad w_3 = -0{,}914$ $w_4 = 1{,}073,\quad w_5 = 0{,}048,\quad w_6 = -0{,}086,$ $w_7 = -0{,}869,\quad w_8 = 0{,}322,\quad w_9 = -0{,}466,$ $w_{10} = -0{,}318,\quad w_{11} = -0{,}093,\quad w_{12} = -0{,}241,$
$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$	$w_1 = 0{,}567,\quad w_2 = -0{,}870,\quad w_3 = 0{,}794,$ $w_4 = -0{,}964,\quad w_5 = 0{,}148,\quad w_6 = -0{,}320,$ $w_7 = 0{,}128,\quad w_8 = -0{,}121,\quad w_9 = 0{,}720,$ $w_{10} = -0{,}331,\quad w_{11} = -0{,}030,\quad w_{12} = 0{,}081,$

Dla tego stanu i dla parametrów $\eta_2 = 10{,}6410, \eta_3 = 13{,}1026$ funkcją dającą największy wkład jest $B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$, dla której wzbudzenia pojawiają się przy zmiennych $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$. Dla pozostałych zbiorów parametrów funkcją dominującą jest $B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$, co daje wzbudzenie przy zmiennych $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{32}$.

(5) Dla stanów trzeciego pasma, gdzie

$$2^-, 4^-\colon\ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^E_{JM} \tag{710}$$

zostały otrzymane następujące wartości dla stanu 2^-:

funkcja bazowa	$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$
$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$	0,1646	0,9707	0,5047
$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E$	0,0288	0,0135	0,0173
$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E$	0,2340	0,0011	0,0273
$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E$	0,5767	0,0049	0,4570

	współczynniki dla stanu 2^-
$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$w_1 = 7{,}254 \times 10^4,\quad w_2 = -3{,}252 \times 10^4,$ $w_3 = 9{,}014 \times 10^4,\quad w_4 = -14{,}319 \times 10^4,$
$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$w_1 = -2{,}426,\quad w_2 = -0{,}406,$ $w_3 = -0{,}080,\quad w_4 = -0{,}323,$
$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$	$w_1 = -0{,}443,\quad w_2 = -0{,}082,$ $w_3 = -0{,}091,\quad w_4 = 0{,}424.$

Dla parametrów $\eta_2 = 10{,}6410, \eta_3 = 13{,}1026$ funkcja dająca największy wkład jest oznaczona jako $A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E$, co daje wzbudzenie przy zmiennych $\alpha_{30}, \alpha'_{32}, \alpha'_{33}$. Dla $\eta_2 = 10{,}6548, \eta_3 = 6{,}9317$ największy wkład daje funkcja $A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$, dla której wzbudzenia występują przy zmiennych $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$. Dla ostatniego zbioru parametów $\eta_2 = 9{,}9022, \eta_3 = 13{,}7924$ funkcją o największym wkładzie jest $A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$ oraz $A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E$, co daje odpowiednio wzbudzenia przy $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$ i $\alpha_{30}, \alpha'_{32}, \alpha'_{33}$.

Dla stanu 4^- otrzymane wartości wynoszą:

funkcja bazowa	$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$
$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	0,0888	0,5688	0,2806
$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$	0,0709	0,4017	0,2219
$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$	0,0154	0,0080	0,0093
$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$	0,0133	0,0054	0,0080
$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	0,1213	0,0005	0,0130
$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$	0,1178	0,0006	0,0167
$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$	0,3082	0,0035	0,2450
$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$	0,2682	0,0015	0,2120

	współczynniki dla stanu 4^-
$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$w_1 = 3{,}956 \times 10^4$, $w_2 = 3{,}529 \times 10^4$, $w_3 = -1{,}702 \times 10^4$, $w_4 = -1{,}5825 \times 10^4$, $w_5 = 4{,}6421 \times 10^4$, $w_6 = 4{,}579 \times 10^4$, $w_7 = -7{,}4882 \times 10^4$, $w_8 = -6{,}9850 \times 10^4$
$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$w_1 = 0{,}754$, $w_2 = 0{,}634$, $w_3 = 0{,}129$ $w_4 = 0{,}102$, $w_5 = 0{,}022$, $w_6 = 0{,}024$, $w_7 = 0{,}107$, $w_8 = 0{,}077$
$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$	$w_1 = 0{,}734$, $w_2 = 0{,}652$, $w_3 = 0{,}134$ $w_4 = 0{,}124$, $w_5 = 0{,}139$, $w_6 = 0{,}162$, $w_7 = -0{,}689$, $w_8 = -0{,}641$

Dla pierwszego zbioru parametrów największy wkład dają funkcje $A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$ i $A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$, dla których wzbudzenia są przy zmiennych $\alpha_{30}, \alpha'_{32}, \alpha'_{33}$. Dla drugiego zbioru parametów tymi funkcjami są $A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$ i $A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$, dla których wzbudzenia występują przy zmiennych $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$. Dla ostatniego zbioru parametrów najbardziej istotną funkcją jest $A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$, dla której wzbudzenia są przy $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$.

(6) W trzecim paśmie, gdzie

$$
\begin{aligned}
4^-: &\ \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(-);E}R_{JM}^{E}, \\
2^-: &\ \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E}R_{JM}^{E}
\end{aligned}
\tag{711}
$$

rozkład prawdopodobieństwa dla stanu 2^- wynosi:

funkcja bazowa	$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$
$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$	0,7873	0,0721	0,1978
$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E$	0,0116	0,7517	0,6144
$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E$	0,1677	0,0163	0,0182
$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E$	0,0429	0,4805	0,1733

	współczynniki dla stanu 2^-
$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$w_1 = 2{,}723,\quad w_2 = -0{,}330,\quad w_3 = 1{,}228,$ $w_4 = 0{,}638$
$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$w_1 = -0{,}441,\quad w_2 = 1{,}163,\quad w_3 = -0{,}210$ $w_4 = -0{,}708$
$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$	$w_1 = -0{,}875,\quad w_2 = 1{,}554,\quad w_3 = -0{,}243$ $w_4 = -0{,}825$

Dla parametrów $\eta_2 = 10{,}6410, \eta_3 = 13{,}1026$ największy wkład do tego stanu daje funkcja $B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$, ze wzbudzeniami przy $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$. Dla pozostałych parametrów największy wkład daje funkcja $B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E$ mająca wzbudzenia przy zmiennych $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{32}$.

Dla stanu 4^-:

funkcja bazowa	$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$
$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	0,6151	0,0563	0,1545
$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$	0,1722	0,0158	0,0433
$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$	0,0091	0,5873	0,4800
$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$	0,0025	0,1644	0,1344
$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	0,1310	0,0127	0,0142
$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$	0,0367	0,0036	0,0040
$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$	0,0335	0,3754	0,1354
$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$	0,0094	0,1051	0,0379

	współczynniki dla stanu 4^-
$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$w_1 = 3{,}203, \quad w_2 = -1{,}695, \quad w_3 = -0{,}388,$ $w_4 = 0{,}205, \quad w_5 = 1{,}445, \quad w_6 = -0{,}765,$ $w_7 = 0{,}751, \quad w_8 = -0{,}397$
$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$w_1 = -0{,}346, \quad w_2 = 0{,}183, \quad w_3 = 0{,}912$ $w_4 = -0{,}483, \quad w_5 = -0{,}165, \quad w_6 = 0{,}087,$ $w_7 = -0{,}555, \quad w_8 = 0{,}294$
$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$	$w_1 = -0{,}569, \quad w_2 = 0{,}301, \quad w_3 = 1{,}009$ $w_4 = -0{,}534, \quad w_5 = -0{,}158, \quad w_6 = 0{,}084,$ $w_7 = -0{,}536, \quad w_8 = 0{,}283$

Dla tego stanu i parametrów $\eta_2 = 10{,}6410, \eta_3 = 13{,}1026$ największy wkład daje funkcja $A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$ mająca wzbudzenia przy $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$. Dla pozostałych parametrów istotną funkcją jest $A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$ ze wzbudzeniami przy $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{32}$.

(7) W trzecim paśmie opisanym przez funkcje

$$\begin{aligned} 4^-\colon\ & \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^E_{JM}, \\ 2^-\colon\ & \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^E_{JM} \end{aligned} \tag{712}$$

stan 2^- ma następujący rozkład prawdopodobieństwa:

funkcja bazowa	$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$
$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$	0,7873	0,0721	0,1978
$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E$	0,0116	0,7517	0,6144
$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E$	0,1677	0,0163	0,0182
$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E$	0,0429	0,4805	0,1733

	współczynniki dla stanu 2^-
$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$w_1 = 2{,}723, \quad w_2 = -0{,}330, \quad w_3 = 1{,}228,$ $w_4 = 0{,}638$
$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$w_1 = -0{,}441, \quad w_2 = 1{,}163, \quad w_3 = -0{,}210$ $w_4 = -0{,}708$
$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$	$w_1 = -0{,}875, \quad w_2 = 1{,}554, \quad w_3 = -0{,}243$ $w_4 = -0{,}825$

Dla stanu 2^- i dla parametrów $\eta_2 = 10{,}6410, \eta_3 = 13{,}1026$ największy wkład daje funkcja $A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$, a dla pozostałych parametrów $A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E$. Posiadają one wzbudzenia identyczne jak dla funkcji z wcześniejszego wyboru trzeciego pasma.

Dla stanu 4^- mamy:

funkcja bazowa	$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$
$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	0,6151	0,0563	0,1545
$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$	0,1722	0,0158	0,0433
$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$	0,0091	0,5873	0,4800
$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$	0,0025	0,1644	0,1344
$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	0,1310	0,0127	0,0142
$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$	0,0367	0,0036	0,0040
$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$	0,0335	0,3754	0,1354
$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$	0,0094	0,1051	0,0379

	współczynniki dla stanu 4^-
$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$w_1 = 3{,}203, \quad w_2 = -1{,}695, \quad w_3 = -0{,}388,$ $w_4 = 0{,}205, \quad w_5 = 1{,}445, \quad w_6 = -0{,}765,$ $w_7 = 0{,}751, \quad w_8 = -0{,}397$
$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$w_1 = -0{,}346, \quad w_2 = 0{,}183, \quad w_3 = 0{,}912$ $w_4 = -0{,}483, \quad w_5 = -0{,}165, \quad w_6 = 0{,}087,$ $w_7 = -0{,}555, \quad w_8 = 0{,}294$
$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$	$w_1 = -0{,}569, \quad w_2 = 0{,}301, \quad w_3 = 1{,}009$ $w_4 = -0{,}534, \quad w_5 = -0{,}158, \quad w_6 = 0{,}084,$ $w_7 = -0{,}536, \quad w_8 = 0{,}283$

Dla tego stanu największy wkład dają funkcje: dla pierwszego zbioru parametrów jest to $B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$, dla pozostałych $B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$. Mają one wzbudzenia identyczne jak dla wcześniejszego przykładu.

(8) Gdy trzecie pasmo opisane jest przez stany

$$2^-, 4^-\colon\ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^E_{JM} \tag{713}$$

otrzymane prawdopodobieństwa dla stanu 2^- wynoszą:

funkcja bazowa	$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$
$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$	0,3299	0,9679	0,5884
$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E$	0,0189	0,0135	0,0066
$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E$	0,2762	0,0013	0,0961
$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E$	0,3821	0,0062	0,3216

	współczynniki dla stanu 2^-
$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$w_1 = -1{,}303, \quad w_2 = 0{,}321, \quad w_3 = -1{,}189,$ $w_4 = 1{,}420$
$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$w_1 = -2{,}517, \quad w_2 = -0{,}432, \quad w_3 = -0{,}093$ $w_4 = -0{,}362$
$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$	$w_1 = -1{,}526, \quad w_2 = -0{,}163, \quad w_3 = -0{,}581$ $w_4 = 1{,}140$

Dla stanu 2^- i pierwszego zbioru parametrów najbardziej istotną funkcją jest $B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E$ ze wzbudzeniami przy $\alpha_{30}, \alpha'_{32}, \alpha'_{33}$. Dla pozostałych parametrów największy wkład daje funkcja $B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$ ze wzbudzeniami przy zmiennych $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$.

Dla stanu 4^-:

funkcja bazowa	$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$
$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	0,1650	0,4840	0,2942
$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$	0,1650	0,4840	0,2942
$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$	0,0094	0,0068	0,0033
$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$	0,0094	0,0068	0,0033
$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	0,1381	0,0007	0,0481
$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$	0,1381	0,0007	0,0481
$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$	0,1911	0,0031	0,1608
$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$	0,1911	0,0031	0,1608

	współczynniki dla stanu 4^-
$\eta_2 = 10{,}6410$ $\eta_3 = 13{,}1026$	$w_1 = -1{,}076, \quad w_2 = -1{,}076, \quad w_3 = 0{,}265,$ $w_4 = 0{,}265, \quad w_5 = -0{,}982, \quad w_6 = -0{,}982,$ $w_7 = 1{,}173, \quad w_8 = 1{,}173$
$\eta_2 = 10{,}6548$ $\eta_3 = 6{,}9317$	$w_1 = 0{,}877, \quad w_2 = 0{,}877, \quad w_3 = 0{,}150$ $w_4 = 0{,}150, \quad w_5 = 0{,}033, \quad w_6 = 0{,}033,$ $w_7 = 0{,}126, \quad w_8 = 0{,}126$
$\eta_2 = 9{,}9022$ $\eta_3 = 13{,}7924$	$w_1 = -1{,}459, \quad w_2 = -1{,}459, \quad w_3 = -0{,}156$ $w_4 = -0{,}156, \quad w_5 = -0{,}555, \quad w_6 = -0555,$ $w_7 = 1{,}090, \quad w_8 = 1{,}090$

Dla tego stanu i każdego wyboru parametrów największy wkład dają dwie funkcje mające identyczną część wibracyjną. Dla pierwszego zbioru parametrów jest to $B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$ i $B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$. Mają one wzbudzenia przy $\alpha_{30}, \alpha'_{32}, \alpha'_{33}$. Dla pozostałych zbiorów parametrów są

to funkcje $B_1(E\!:u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$ i $B_1(E\!:u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$, ze wzbudzeniami przy $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$.

E.2 Model o innej strukturze trzeciego pasma

W omawianym modelu istnieje siedem schematów najlepiej odtwarzających wartości eksperymentalne [5, 6] dla rozważanych trzech pasm energetycznych ^{156}Gd. Wszystkie schematy można podzielić na trzy grupy, do których należą schematy o numerach 1 i 2, 3 i 4 oraz 5, 6 i 7.

Wszystkie schematy mają taką samą budowę dwóch pierwszych pasm, tj.:

$$\begin{aligned} &4^+ : \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{JM}_{A_1}, \qquad 5^- : \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \\ &2^+ : \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{JM}_{B_1}, \qquad 3^- : \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}. \\ &0^+ : \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(+);A_1}_{vib3}R^{JM}_{A_1}, \end{aligned} \tag{714}$$

Różnią się one jedynie parametrami opisującymi stany oraz budową trzeciego pasma.

(I) Pierwsze dwa schematy mają następujące parametry opisujące stany dla dwóch pierwszych pasm:

$$\begin{aligned} \eta_2 &= 10{,}655, \quad \eta_3 = 6{,}932, \\ \mathring{\alpha}_{20} &= 0{,}34, \quad \mathring{\alpha}_{22} = 10^{-5}, \end{aligned} \tag{715}$$

$$\mathring{\alpha}_{30} = -0{,}034, \ \ \mathring{\alpha}'_{31} = -0{,}068, \ \ \mathring{\alpha}'_{32} = -0{,}415, \ \ \mathring{\alpha}'_{33} = -0{,}080 \tag{716}$$

oraz parametry dla stanów występujących w trzecim paśmie:

$$\begin{aligned} \eta_2 &= 7{,}648, \qquad \eta_3 = 7{,}273, \\ \mathring{\alpha}_{20} &= -0{,}332, \quad \mathring{\alpha}_{22} = 0{,}580, \end{aligned} \tag{717}$$

$$\mathring{\alpha}_{30} = 0{,}041, \ \ \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}024, \ \ \mathring{\alpha}'_{32} = -0{,}018, \ \ \mathring{\alpha}'_{33} = -0{,}073. \tag{718}$$

(1) W schemacie 1. postać trzeciego pasma jest następująca:

$$\begin{aligned} &4^- : \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \\ &2^- : \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_{E}, \end{aligned} \tag{719}$$

gdzie wartości przejść mieszczą się w przedziałach niepewności pomiarowej wyznaczonych w eksperymencie:

$$\begin{aligned} B(E2:4^- \to 2^-) &= 724\ W.u, \\ B(E1:4^- \to 4^+) &= 0{,}103 \times 10^{-3}\ W.u, \\ B(E1:2^- \to 2^+) &= 1{,}359 \times 10^{-7}\ W.u. \end{aligned} \tag{720}$$

(2) W schemacie 2. trzecie pasmo ma postać:

$$\begin{aligned} 4^- &: \ \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E}R_E^{JM}, \\ 2^- &: \ \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(-);E}R_E^{JM}, \end{aligned} \tag{721}$$

dla którego $B(E1:4^- \to 4^+)$ ma wartość bliską granicy górnej przedziału niepewności pomiarowej, ale nie mieści się w samym przedziale oraz $B(E1:2^- \to 2^+)$ jest o jeden rząd większe od granicznej wartości wynikającej z eksperymentu:

$$\begin{aligned} B(E2:4^- \to 2^-) &= 724\ W.u, \\ B(E1:4^- \to 4^+) &= 0{,}505 \times 10^{-3}\ W.u, \\ B(E1:2^- \to 2^+) &= 0{,}596 \times 10^{-3}\ W.u. \end{aligned} \tag{722}$$

(II) Kolejne dwa schematy mają następujące parametry opisujące stany dla dwóch pierwszych pasm:

$$\begin{aligned} \eta_2 = 9{,}902, \quad \eta_3 = 13{,}792, \\ \mathring{\alpha}_{20} = 0{,}34, \quad \mathring{\alpha}_{22} = 10^{-5}, \end{aligned} \tag{723}$$

$$\mathring{\alpha}_{30} = 0{,}106, \quad \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}099, \quad \mathring{\alpha}'_{32} = 0{,}090, \quad \mathring{\alpha}'_{33} = 0{,}123 \tag{724}$$

oraz parametry dla trzeciego pasma:

$$\begin{aligned} \eta_2 = 7{,}648, \qquad \eta_3 = 7{,}273, \\ \mathring{\alpha}_{20} = -0{,}332, \quad \mathring{\alpha}_{22} = 0{,}580, \end{aligned} \tag{725}$$

$$\mathring{\alpha}_{30} = 0{,}041, \quad \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}024, \quad \mathring{\alpha}'_{32} = -0{,}018, \quad \mathring{\alpha}'_{33} = -0{,}073. \tag{726}$$

(3) W schemacie 3. trzecie pasmo ma postać:

$$\begin{aligned} 4^- &: \ \psi_{vib2}^{A_1}\psi_{vib3}^{(-);E}R_E^{JM}, \\ 2^- &: \ \psi_{vib2}^{B_1}\psi_{vib3}^{(-);E}R_E^{JM}, \end{aligned} \tag{727}$$

gdzie $B(E1:2^- \to 2^+)$ mieści się w przedziale wyznaczonym z eksperymentu, a $B(E1:4^- \to 4^+)$ jest trzy rzędy za małe:

$$\begin{aligned} B(E2:4^- \to 2^-) &= 724\ W.u, \\ B(E1:4^- \to 4^+) &= 1{,}565 \times 10^{-7}\ W.u, \\ B(E1:2^- \to 2^+) &= 0{,}000054\ W.u. \end{aligned} \tag{728}$$

(4) W schemacie 4. postać trzeciego pasma jest następująca:

$$\begin{aligned} 4^- &: \ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E, \\ 2^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E, \end{aligned} \tag{729}$$

gdzie $B(E1 : 4^- \to 4^+)$ ma wartość bliską górnej granicy przedziału niepewności eksperymentalnej, a $B(E1 : 2^- \to 2^+)$ jest o jeden rząd za duże:

$$\begin{aligned} B(E2 : 4^- \to 2^-) &= 724\, W.u, \\ B(E1 : 4^- \to 4^+) &= 0{,}384 \times 10^{-3}\, W.u, \\ B(E1 : 2^- \to 2^+) &= 0{,}675 \times 10^{-3}\, W.u. \end{aligned} \tag{730}$$

(III) Ostatnie trzy schematy mają następujące parametry opisujące stany dla dwóch pierwszych pasm:

$$\begin{aligned} \eta_2 = 10{,}641, &\quad \eta_3 = 13{,}103, \\ \mathring{\alpha}_{20} = 0{,}340, &\quad \mathring{\alpha}_{22} = 10^{-5}, \end{aligned} \tag{731}$$

$$\mathring{\alpha}_{30} = 0{,}111, \quad \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}099, \quad \mathring{\alpha}'_{32} = 0{,}108, \quad \mathring{\alpha}'_{33} = 0{,}110. \tag{732}$$

(5) W schemacie 5. trzecie pasmo zbudowane jest z następujących stanów:

$$\begin{aligned} 4^- &: \ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E, \\ 2^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E, \end{aligned} \tag{733}$$

gdzie

$$\begin{aligned} \eta_2 = 7{,}648, &\quad \eta_3 = 7{,}273, \\ \mathring{\alpha}_{20} = -0{,}332, &\quad \mathring{\alpha}_{22} = 0{,}580, \end{aligned} \tag{734}$$

$$\mathring{\alpha}_{30} = 0{,}041, \quad \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}024, \quad \mathring{\alpha}'_{32} = -0{,}018, \quad \mathring{\alpha}'_{33} = -0{,}073. \tag{735}$$

Otrzymane zredukowane prawdopodobieństwa przejść mają następującą wartość:

$$\begin{aligned} B(E2 : 4^- \to 2^-) &= 724\, W.u, \\ B(E1 : 4^- \to 4^+) &= 0{,}111 \times 10^{-3}\, W.u, \\ B(E1 : 2^- \to 2^+) &= 0{,}457 \times 10^{-3}\, W.u. \end{aligned} \tag{736}$$

W (736) $B(E1 : 4^- \to 4^+)$ odtwarza wartość eksperymentalną, a $B(E1 : 2^- \to 2^+)$ jest o rząd większe w stosunku do granicy górnej.

(6) W schemacie 6. postać trzeciego pasma jest natępująca:

$$\begin{aligned} 4^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \\ 2^- &: \ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \end{aligned} \tag{737}$$

gdzie

$$\begin{aligned} \eta_2 = 7{,}648, \quad & \eta_3 = 7{,}273, \\ \mathring{\alpha}_{20} = -0{,}332, \quad & \mathring{\alpha}_{22} = 0{,}580, \end{aligned} \tag{738}$$

$$\mathring{\alpha}_{30} = 0{,}041, \ \ \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}024, \ \ \mathring{\alpha}'_{32} = -0{,}018, \ \ \mathring{\alpha}'_{33} = -0{,}073, \tag{739}$$

a

$$\begin{aligned} B(E2 : 4^- \to 2^-) &= 724\ W.u, \\ B(E1 : 4^- \to 4^+) &= 1{,}030 \times 10^{-7}\ W.u, \\ B(E1 : 2^- \to 2^+) &= 7{,}200 \times 10^{-6}\ W.u, \end{aligned} \tag{740}$$

gdzie $B(E1 : 2^- \to 2^+)$ mieści się w przedziale niepewności, a wartość $B(E1 : 4^- \to 4^+)$ jest o trzy rzędy za małe.

(7) W schemacie 7. trzecie pasmo ma postać :

$$\begin{aligned} 4^- &: \ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \\ 2^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3} R^{JM}_E, \end{aligned} \tag{741}$$

gdzie

$$\begin{aligned} \eta_2 = 8{,}311, \quad & \eta_3 = 11{,}421, \\ \mathring{\alpha}_{20} = -0{,}312, \quad & \mathring{\alpha}_{22} = 0{,}604, \end{aligned} \tag{742}$$

$$\mathring{\alpha}_{30} = -0{,}001, \ \ \mathring{\alpha}'_{31} = 0{,}043, \ \ \mathring{\alpha}'_{32} = -0{,}064, \ \ \mathring{\alpha}'_{33} = -0{,}129, \tag{743}$$

natomiast

$$\begin{aligned} B(E2 : 4^- \to 2^-) &= 724\ W.u, \\ B(E1 : 4^- \to 4^+) &= 1{,}144 \times 10^{-6}\ W.u, \\ B(E1 : 2^- \to 2^+) &= 6{,}968 \times 10^{-7}\ W.u, \end{aligned} \tag{744}$$

gdzie podobnie jak w schemacie 6: $B(E1 : 2^- \to 2^+)$ mieści się w przedziale niepewności, a $B(E1 : 4^- \to 4^+)$ jest o trzy rzędy za małe.

W przedstawionych poniżej tabelach wartości prawdopodobieństw odpowiadają z jakim dany iloczyn trzech funkcji bazowych wchodzi w skład stanu, a wielkość otrzymana z odjęcia otrzymanego prawdopodobieństwa dotyczy iloczynów ortogonalnych do danego.

Stan 2^+

(i) dla schematu 1 i 2:

funkcja bazowa	$(B_1 : u_0 u_0)A_1 B_1$	$(B_1 : u_1 u_0)A_1 B_1$	$(B_1 : u_0 u_1)A_1 B_1$
prawdop.	0,9448	0,0542	0,0011

Współczynniki $w_i,\ i = 1, 2, 3$:

$$w_1 = 0{,}773, \quad w_2 = 0{,}185, \quad w_3 = -0{,}026, \tag{745}$$

(ii) dla schematu 3 i 4:

funkcja bazowa	$(B_1 : u_0 u_0)A_1 B_1$	$(B_1 : u_1 u_0)A_1 B_1$	$(B_1 : u_0 u_1)A_1 B_1$
prawdop.	0,9316	0,0685	0,0002

Współczynniki $w_i,\ i = 1, 2, 3$:

$$w_1 = -1{,}346, \quad w_2 = -0{,}364, \quad w_3 = -0{,}019, \tag{746}$$

(iii) dla schematu 5, 6 i 7:

funkcja bazowa	$(B_1 : u_0 u_0)A_1 B_1$	$(B_1 : u_1 u_0)A_1 B_1$	$(B_1 : u_0 u_1)A_1 B_1$
prawdop.	0,968	0,0277	0,0036

Współczynniki $w_i,\ i = 1, 2, 3$:

$$w_1 = -0{,}580, \quad w_2 = -0{,}098, \quad w_3 = 0{,}035. \tag{747}$$

Z podanych wyników widać, że dla wszystkich schematów stanu 2^+ wkład dominujący ma funkcja nie posiadająca wzbudzenia zarówno w części kwadrupolowej, pochodzącej z rzutu funkcji $u_0(\eta_2; \alpha_{20} - \mathring{\alpha}_{20})u_0(\sqrt{2}\eta_2; \alpha_{22} - \mathring{\alpha}_{22})$ na reprezentację B_1, jak i oktupolowej, która jest funkcją symetryczną względem obrotów, należy do reprezentacji A_1 i ma postać

$$u_0(\eta_3; \alpha_{30})u_0(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{32})u_0(\sqrt{2}\eta_3; \alpha'_{33}). \tag{748}$$

Stan 4^+ Wkłady procentowe jaki wnoszą poszczególne wektory bazowe przedstawione są poniżej w tabelach. Podobnie jak dla stanu 2^+ otrzymane parametry są wspólne dla dwóch lub trzech schematów:

(i) dla schematów 1 i 2:

funkcja bazowa	$(A_1 : u_0 u_0) A_1 A_{1;1}$	$(A_1 : u_1 u_0) A_1 A_{1;1}$
prawdop.	0,6070	0,3273

funkcja bazowa	$(A_1 : u_0 u_1) A_1 A_{1;1}$	$(A_1 : u_0 u_0) A_1 A_{1;2}$
prawdop.	0,0026	0,1807

funkcja bazowa	$(A_1 : u_1 u_0) A_1 A_{1;2}$	$(A_1 : u_0 u_1) A_1 A_{1;2}$
prawdop.	0,0567	0,0194

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 6$:

$$w_1 = 0{,}910, \quad w_2 = 0{,}745, \quad w_3 = 0{,}232, \qquad (749)$$
$$w_4 = 0{,}066, \quad w_5 = 0{,}177, \quad w_6 = 0{,}293,$$

(ii) dla schematów 3 i 4:

funkcja bazowa	$(A_1 : u_0 u_0) A_1 A_{1;1}$	$(A_1 : u_1 u_0) A_1 A_{1;1}$
prawdop.	0,4358	0,1412

funkcja bazowa	$(A_1 : u_0 u_1) A_1 A_{1;1}$	$(A_1 : u_0 u_0) A_1 A_{1;2}$
prawdop.	0,0294	0,0001

funkcja bazowa	$(A_1 : u_1 u_0) A_1 A_{1;2}$	$(A_1 : u_0 u_1) A_1 A_{1;2}$
prawdop.	0,0007	0,1094

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 6$:

$$w_1 = -2{,}354, \quad w_2 = -1{,}273, \quad w_3 = 0{,}088, \qquad (750)$$
$$w_4 = -1{,}425, \quad w_5 = -0{,}696, \quad w_6 = 0{,}807,$$

(iii) dla schematów 5, 6 i 7:

funkcja bazowa	$(A_1 : u_0 u_0) A_1 A_{1;1}$	$(A_1 : u_1 u_0) A_1 A_{1;1}$
prawdop.	0,8617	0,0003

funkcja bazowa	$(A_1 : u_0 u_1) A_1 A_{1;1}$	$(A_1 : u_0 u_0) A_1 A_{1;2}$
prawdop.	0,0410	0,1855

funkcja bazowa	$(A_1 : u_1 u_0) A_1 A_{1;2}$	$(A_1 : u_0 u_1) A_1 A_{1;2}$
prawdop.	0,0392	0,0026

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 6$:

$$w_1 = 1{,}374, \quad w_2 = 0{,}274, \quad w_3 = -0{,}352, \qquad (751)$$
$$w_4 = 0{,}248, \quad w_5 = 0{,}425, \quad w_6 = -0{,}142.$$

Analogicznie jak dla stanu 2^+, również tutaj największy wkład do pełnej funkcji ma funkcja nie posiadająca wzbudzeń.

Stan 3^- Prawdopodobieństwo z jakim określona funkcja bazowa wchodzi w skład stanu 3^- jest dane w poniższych tabelach:

(i) dla schematów 1 i 2:

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,0011	0,1647

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,4173	0,0094

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,2448	0,1165

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$
prawdop.	0,1927	0,0005

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 8$:

$$\begin{aligned} w_1 = -0{,}047, \quad w_2 = 0{,}586, \quad w_3 = 0{,}809, \quad w_4 = 0{,}148, \\ w_5 = -0{,}714, \quad w_6 = 0{,}493, \quad w_7 = -0{,}333, \quad w_8 = 0{,}023. \end{aligned} \tag{752}$$

Dla omawianych schematów największy wkład w stan 3^- ma funkcja oznaczona jako $A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$, tj. dla której część oktupolowa powstała z rzutowania $u_0(\eta_3; \alpha_{30} - \mathring{\alpha}_{30})u_1(\sqrt{2}\eta_2; \alpha'_{31} - \mathring{\alpha}'_{31})u_0(\sqrt{2}\eta_2; \alpha'_{32} - \mathring{\alpha}'_{32})u_0(\sqrt{2}\eta_2; \alpha'_{33} - \mathring{\alpha}'_{33})$ na reprezentację dwuwymiarową E. Dla tego rzutu otrzymana funkcja posiada w każdej funkcji składowej jedno wzbudzenie występujące przy α'_{31} albo α_{30} albo α'_{32}.

(ii) dla schematów 3 i 4:

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,0844	0,0805

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,4472	0,0727

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,0388	0,1571

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$
prawdop.	0,0929	0,0354

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 8$:

$$w_1 = 0{,}525, \quad w_2 = -0{,}502, \quad w_3 = -1{,}231, \quad w_4 = 0{,}496, \qquad (753)$$
$$w_5 = 0{,}348, \quad w_6 - 0{,}716, \quad w_7 = -0{,}562, \quad w_8 = -0{,}346.$$

Dla schematów 3 i 4 największy wkład posiada taka sama funkcja jak dla modeli 1 i 2.

(iii) dla schematów 5, 6 i 7:

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,1663	0,2545

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,2571	0,0639

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,0030	0,0237

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$
prawdop.	0,2208	0,0117

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 8$:

$$w_1 = 0{,}519, \quad w_2 = -0{,}641, \quad w_3 = -0{,}649, \quad w_4 = 0{,}322, \qquad (754)$$
$$w_5 = 0{,}063, \quad w_6 - 0{,}188, \quad w_7 = -0{,}602, \quad w_8 = -0{,}137.$$

W trzech ostatnich schematach największy wkład posiadają funkcje oznaczone jako $A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$, $A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$ oraz $A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$. Dla pierwszej funkcji wzbudzenia występują przy $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{32}$ dla drugiej przy $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$, a dla trzeciej przy $\alpha'_{31}, \alpha'_{32}, \alpha'_{33}$.

Stan 5$^-$ Prawdopodobieństwa z jakimi określona funkcja bazowa wchodzi w skład stanu 5$^-$ są dane w poniższych tabelach:

(i) dla schematów 1 i 2:

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,0143	0,2116

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;3}$	$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$
prawdop.	0,1857	0,3155

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$	$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;3}$
prawdop.	0,0019	$3{,}0342^{-6}$

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,1679	0,0231

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;3}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$
prawdop.	0,0482	0,1142

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;3}$
prawdop.	0,0027	0,0098

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 12$:

$$w_1 = 0{,}253, \quad w_2 = 0{,}976, \quad w_3 = -0{,}914, \quad w_4 = 1{,}073,$$
$$w_5 = 0{,}048, \quad w_6 = -0{,}086, \quad w_7 = -0{,}869, \quad w_8 = 0{,}322,$$
$$w_9 = -0{,}466, \quad w_{10} = -0{,}318, \quad w_{11} = -0{,}093, \quad w_{12} = -0{,}241. \tag{755}$$

Dla tych schematów największy wkład posiada funkcja oznaczona jako $B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$, gdzie wzbudzenia występują przy $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{32}$.

(ii) dla schematów 3 i 4 otrzymujemy:

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,9377	0,2200

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;3}$	$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$
prawdop.	0,1909	0,2677

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$	$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;3}$
prawdop.	0,0063	0,0294

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,0060	0,0061

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;3}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$
prawdop.	0,1587	0,034

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;3}$
prawdop.	0,0003	0,0019

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 12$:

$$w_1 = 0{,}567, \quad w_2 = -0{,}870, \quad w_3 = 0{,}794, \quad w_4 = -0{,}964,$$
$$w_5 = 0{,}148, \quad w_6 = -0{,}320, \quad w_7 = 0{,}128, \quad w_8 = -0{,}121,$$
$$w_9 = 0{,}720, \quad w_{10} = -0{,}331, \quad w_{11} = -0{,}030, \quad w_{12} = 0{,}081. \tag{756}$$

Dla tych schematów największy wkład posiada funkcja oznaczona jako $B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$, gdzie wzbudzenia występują przy $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{33}$.

(iii) dla schematów 5, 6 i 7 uzyskujemy:

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,1290	0,2299

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;3}$	$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$
prawdop.	0,1028	0,1546

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$	$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;3}$
prawdop.	0,0813	0,0545

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,0090	0,0285

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;3}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$
prawdop.	0,0947	0,0495

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;3}$
prawdop.	0,0033	0,0672

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 12$:

$$w_1 = 0{,}567, \quad w_2 = -0{,}756, \quad w_3 = 0{,}501, \quad w_4 = -0{,}624,$$
$$w_5 = 0{,}452, \quad w_6 = -0{,}371, \quad w_7 = 0{,}143, \quad w_8 = -0{,}257,$$
$$w_9 = 0{,}481, \quad w_{10} = -0{,}355, \quad w_{11} = 0{,}092, \quad w_{12} = -0{,}412. \tag{757}$$

W tym przypadku największy wkład posiada funkcja oznaczone jako $B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$, gdzie wzbudzenia występują przy α'_{31} albo α_{30} albo α'_{33}. $E_{;2}$ - określa drugą z trzech równoważnych reprezentacji dwuwymiarowych E.

Dla trzeciego pasma, oktupolowego o parzystym momencie pędu, wszystkie parametry opisujące stany zostały znalezione oddzielnie. Oznacza to, że zgodnie z założeniami, również takie parametry jak η_2, η_3, deformacje oktupolowe $\{\mathring{\alpha}_{3\mu}\}$ oraz oktupolowe $\mathring{\alpha}_{20}$, $\mathring{\alpha}_{22}$, były dopasowywane, tak aby odtworzyć przejście $B(E2 : 4^- \rightarrow 2^-)$. Do określenia, który możliwy schemat pasuje do opisu gadolinu, potrzebne były wartości przejść $B(E1 : 4^- \rightarrow 4^+)$ i $B(E1 : 2^- \rightarrow 2^+)$ otrzymane dla wszystkich możliwych modeli. Okazało się, że jedynie dwa możliwe schematy trzeciego pasma dają przybliżone wartości eksperymentalne. Są to przypadki, gdy:

$$\begin{aligned} 4^- &: \ \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E, \\ 2^- &: \ \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E \end{aligned} \tag{758}$$

oraz

$$4^- : \psi^{B_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E,$$
$$2^- : \psi^{A_1}_{vib2}\psi^{(-);E}_{vib3}R^{JM}_E \tag{759}$$

W pozostałych przypadkach, gdy stany 2^- i 4^- mają taką samą budowę pod względem algebraicznym, nie udało się otrzymać wartości przejść $B(E1)$ bliskich danym eksperymentalnym. Poniżej przedstawione są wyniki otrzymane dla stanów 2^- i 4^-, które należą do jednego z pasm (758)-(759).

Stan 2⁻ W przypadku, gdy mamy $\Gamma_1 = A_1$, wówczas istnieją dwa możliwe zbiory parametrów, które odowiadają odpowiednim schematom:

(i) dla schematów 2, 4 i 5:

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E$
prawdop.	0,2483	0,7207

funkcja bazowa c.d.	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E$	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E$
prawdop.	0,3107	0,0230

Współczynniki $w_i,\ i = 1, 2, 3, 4$:

$$w_1 = -0{,}170, \quad w_2 = 0{,}649, \quad w_3 = 0{,}298, \quad w_4 = -0{,}053. \tag{760}$$

W tym stanie największy wkład posiada funkcja $A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E$, gdzie wzbudzenia występują przy α'_{31} albo α_{30} albo α'_{32}.

(ii) dla schematu 7 otrzymujemy:

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E$
prawdop.	0,0664	0,3495

funkcja bazowa c.d.	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E$	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E$
prawdop.	0,5293	0,0495

Współczynniki $w_i,\ i = 1, 2, 3, 4$:

$$w_1 = -0{,}207, \quad w_2 = 0{,}462, \quad w_3 = 0{,}565, \quad w_4 = -0{,}179. \tag{761}$$

W tym przypadku największy wkład posiada funkcja $A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E$, gdzie wzbudzenia występują przy α'_{32} albo α_{31} albo α'_{33}.

Gdy $\Gamma_1 = B_1$ wówczas mamy tylko jedną możliwość opisu stanu, która dotyczy schematów 1,3 i 6:

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E$	$B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E$
prawdop.	0,2483	0,7207

funkcja bazowa c.d.	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E$	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E$
prawdop.	0,3107	0,0230

Współczynniki $w_i,\ i = 1, 2, 3, 4$:

$$w_1 = -0{,}170, \quad w_2 = 0{,}649, \quad w_3 = 0{,}298, \quad w_4 = -0{,}053. \tag{762}$$

W tym przypadku największy wkład posiada funkcja $B_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E$, gdzie wzbudzenia występują przy α'_{31} albo α_{30} albo α'_{32}.

Analogiczną sytuację mamy dla **stanu 4**$^-$ gdy $\Gamma_1 = A_1$ wówczas mamy jeden zbiór parametrów opisujący każdy ze schematów 1, 3 i 6:

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,3414	0,3443

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,1134	0,0310

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,3876	0,1452

funkcja bazowa	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$	$A_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$
prawdop.	0,0911	0,2159

Współczynniki $w_i,\ i = 1, \ldots, 8$:

$$\begin{gathered} w_1 = -0{,}448, \quad w_2 = 0{,}524, \quad w_3 = 0{,}346, \quad w_4 = -0{,}220, \\ w_5 = 0{,}566, \quad w_6 = -0{,}120, \quad w_7 = -0{,}057, \quad w_8 = 0{,}369. \end{gathered} \tag{763}$$

Największy wkład do tego stanu wnosi funkcja $A_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$ mająca wzbudzenia przy α'_{32} albo α'_{31} albo α'_{33} oraz dwie funkcje $A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$ i $A_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$ ze wzbudzeniami przy α_{30} albo α'_{31} albo α'_{33}.

Gdy $\Gamma_1 = B_1$ wówczas dla pozostałych schematów mamy:

(i) dla schematów 2, 4 i 5:

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,3414	0,3443

funkcja bazowa	$B1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$	$B1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,1134	0,0310

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,3876	0,1452

funkcja bazowa c.d.	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$
prawdop.	0,0911	0,2159

Współczynniki $w_i,\ i=1,\ldots,8$:

$$\begin{aligned}&w_1=-0{,}448,\quad w_2=0{,}524,\quad w_3=0{,}346,\quad w_4=-0{,}220,\\&w_5=0{,}566,\quad w_6=-0{,}120,\quad w_7=-0{,}057,\quad w_8=0{,}369.\end{aligned}\tag{764}$$

W tym przypadku największy wkład posiadają te same funkcje jak dla schematów 1, 3 i 6, różniące się jedynie reprezentacją części kwadrupolowej, którą obecnie jest B_1.

(ii) dla schematu 7:

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_1u_0u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,1446	0,1182

funkcja bazowa	$B1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;1}$	$B1(E\colon u_0u_1u_0u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,1464	0,0059

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;2}$
prawdop.	0,22425	0,0063

funkcja bazowa	$B_1(E\colon u_0u_0u_1u_0)E_{;1}$	$B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$
prawdop.	0,0008	0,3581

Współczynniki $w_i,\ i=1,\ldots,8$:

$$\begin{aligned}&w_1=-0{,}531,\quad w_2=0{,}475,\quad w_3=0{,}526,\quad w_4=-0{,}125,\\&w_5=0{,}656,\quad w_6=-0{,}106,\quad w_7=-0{,}046,\quad w_8=0{,}815.\end{aligned}\tag{765}$$

Największy wkład do tego stanu wnosi funkcja $B_1(E\colon u_0u_0u_0u_1)E_{;2}$ mająca wzbudzenia przy α'_{33} albo α_{30} albo α'_{32}.

F Własności grupy $\overline{D}_{4;y}$

W tym dodatku przedstawione jest działanie poszczególnych elementów grupy $\overline{D}_{4;y}$ na rzeczywiste zmienne kwadrupolowe i oktupolowe w układzie wewnętrznym. Dodatkowo została przedstawiona konstrukcja oktupolowych funkcji bazowych posiadających odpowiednią parzystość bez użycia operatora parzystości.

F.1 Działanie grupy symetryzacji $\overline{D}_{4;y}$ na rzeczywiste zmienne kolektywne

Działanie grupy symetryzacji $\overline{D}_{4;y}$ na rzeczywiste zmienne:

(i) kwadrupolowe α_{20}, α_{22} przedstawione jest w tabeli 33,

$\overline{g} \in \overline{D}_{4;y}$	$\overline{g}\alpha_{20}$	$\overline{g}\alpha_{22}$
$E, C_{2x}, C_{2y}, C_{2z}$	α_{20}	α_{22}
$C_{4y}, C_{4y}^{-1}, C_{2c}, C_{2d}$	$\sqrt{\frac{3}{2}}\alpha_{22} - \frac{1}{2}\alpha_{20}$	$\frac{1}{2}\big(\sqrt{\frac{3}{2}}\alpha_{20} + \alpha_{22}\big)$

Tablica 33: Tabela działania dla grupy $D_{4;y}$ na zmienne kwadrupolowe.

(ii) oktupolowe α_{30}, α'_{31}, α'_{32}, α'_{33} przedstawiają tabele 34 i 35.

$\overline{g} \in \overline{D}_{4;y}$	$\overline{g}\alpha_{30}$	$\overline{g}\alpha'_{31}$
E	α_{30}	α'_{31}
C_{2y}	$-\alpha_{30}$	$-\alpha'_{31}$
C_{4y}	$\frac{1}{2}\big(-\sqrt{3}\alpha'_{31} + \sqrt{5}\alpha'_{33}\big)$	$\frac{1}{4}\big(\sqrt{3}\alpha_{30} - \sqrt{10}\alpha'_{32}\big)$
C_{4y}^{-1}	$\frac{1}{2}\big(\sqrt{3}\alpha'_{31} - \sqrt{5}\alpha'_{33}\big)$	$\frac{1}{4}\big(-\sqrt{3}\alpha_{30} + \sqrt{10}\alpha'_{32}\big)$
C_{2x}	$-\alpha_{30}$	α'_{31}
C_{2z}	α_{30}	$-\alpha'_{31}$
C_{2c}	$\frac{1}{2}\big(\sqrt{3}\alpha'_{31} - \sqrt{5}\alpha'_{33}\big)$	$\frac{1}{4}\big(\sqrt{3}\alpha_{30} - \sqrt{10}\alpha'_{32}\big)$
C_{2d}	$\frac{1}{2}\big(-\sqrt{3}\alpha'_{31} + \sqrt{5}\alpha'_{33}\big)$	$\frac{1}{4}\big(-\sqrt{3}\alpha_{30} + \sqrt{10}\alpha'_{32}\big)$

Tablica 34: Tabela działania dla grupy $D_{4;y}$ na zmienne oktupolowe, cz.1.

$\overline{g} \in \overline{D}_{4;y}$	$\overline{g}\alpha'_{32}$	$\overline{g}\alpha'_{33}$
E	α'_{32}	α'_{33}
C_{2y}	$-\alpha'_{32}$	$-\alpha'_{33}$
C_{4y}	$\frac{1}{4}\big(\sqrt{10}\alpha'_{31} + \sqrt{6}\alpha'_{33}\big)$	$\frac{1}{4}\big(-\sqrt{5}\alpha_{30} - \sqrt{6}\alpha'_{32}\big)$
C_{4y}^{-1}	$\frac{1}{4}\big(-\sqrt{10}\alpha'_{31} - \sqrt{6}\alpha'_{33}\big)$	$\frac{1}{4}\big(\sqrt{5}\alpha_{30} + \sqrt{6}\alpha'_{32}\big)$
C_{2x}	$-\alpha'_{32}$	α'_{33}
C_{2z}	α'_{32}	$-\alpha'_{33}$
C_{2c}	$\frac{1}{4}\big(-\sqrt{10}\alpha'_{31} - \sqrt{6}\alpha'_{33}\big)$	$\frac{1}{4}\big(-\sqrt{5}\alpha_{30} - \sqrt{6}\alpha'_{32}\big)$
C_{2d}	$\frac{1}{4}\big(\sqrt{10}\alpha'_{31} + \sqrt{6}\alpha'_{33}\big)$	$\frac{1}{4}\big(\sqrt{5}\alpha_{30} + \sqrt{6}\alpha'_{32}\big)$

Tablica 35: Tabela działania dla grupy $D_{4;y}$ na zmienne oktupolowe, cz.2.

F.2 Parzystość fukcji oktupolowych w $\overline{D}_{4;y}$

Funkcje oktupolowe uzyskiwane przez rzutowanie na reprezentacje nieprzywiedlne dowolnej grupy zależą od postaci charakterów lub macierzy reprezentacji oraz od działania tej grupy na zmienne oktupolowe $\{\alpha_{3\mu}\}$. W modelu o zmiennych rzeczywistych (R) mamy cztery wewnętrzne zmienne oktupolowe: α_{30}, α'_{31}, α'_{32}, α'_{33}. Korzystając z tabel 33-35 widać, że wyniki działania obrotów $\overline{D}_{4;y}$ można podzielić na dwa podzbiory różniące się znakami. Ogólnie można to zapisać jako:

$$\begin{aligned} \hat{E}\alpha_{3\mu} &= -\hat{C}_{2y}\alpha_{3\mu} \\ \hat{C}_{4y}\alpha_{3\mu} &= -\hat{C}_{4y}^{-1}\alpha_{3\mu} \\ \hat{C}_{2x}\alpha_{3\mu} &= -\hat{C}_{2z}\alpha_{3\mu} \\ \hat{C}_{2c}\alpha_{3\mu} &= -\hat{C}_{2d}\alpha_{3\mu} \end{aligned} \tag{766}$$

Zgodnie zdefinicją działania grupy wewnętrznej na funkcje zmiennych kolektywnych:

$$\begin{aligned} \overline{g}f(\alpha_{\lambda\mu}) &= f(\overline{g}\alpha_{\lambda\mu}), \\ \hat{I}f(\alpha_{\lambda\mu}) &= f(\hat{I}\alpha_{\lambda\mu}) = f((-1)^{\lambda}\alpha_{\lambda\mu}), \end{aligned} \tag{767}$$

powyższe związki (766) można zapisać dla funkcji następująco:

$$\begin{aligned} \hat{E}f(\alpha_{3\mu}) &= f(\hat{E}\alpha_{3\mu}) = f(-\hat{C}_{2y}\alpha_{3\mu}) = \hat{C}_{2y}f(-\alpha_{3\mu}), \\ \hat{C}_{4y}f(\alpha_{3\mu}) &= f(\hat{C}_{4y}\alpha_{3\mu}) = f(-\hat{C}_{4y}^{-1}\alpha_{3\mu}) = \hat{C}_{4y}^{-1}f(-\alpha_{3\mu}), \\ \hat{C}_{2x}f(\alpha_{3\mu}) &= f(\hat{C}_{2x}\alpha_{3\mu}) = f(-\hat{C}_{2z}\alpha_{3\mu}) = \hat{C}_{2z}f(-\alpha_{3\mu}), \\ \hat{C}_{2c}f(\alpha_{3\mu}) &= f(\hat{C}_{2c}\alpha_{3\mu}) = f(-\hat{C}_{2d}\alpha_{3\mu}) = \hat{C}_{2d}f(-\alpha_{3\mu}). \end{aligned} \tag{768}$$

Pozwala to przedstawić operator rzutowy za pomocą charakterów natępująco:

$$\begin{aligned} \overline{P} \sim \chi_1\hat{E}f(\alpha_{3\mu}) &+ \chi_2\hat{C}_{2y}f(\alpha_{3\mu}) + \chi_3\big(\hat{C}_{4y}f(\alpha_{3\mu}) + \hat{C}_{4y}^{-1}f(\alpha_{3\mu})\big) \\ &+\chi_4\big(\hat{C}_{2x}f(\alpha_{3\mu}) + \hat{C}_{2z}f(\alpha_{3\mu})\big) + \chi_5\big(\hat{C}_{2c}f(\alpha_{3\mu}) + \hat{C}_{2d}f(\alpha_{3\mu})\big), \end{aligned} \tag{769}$$

gdzie χ_i oznacza odpowiednio charakter dla klasy $\mathcal{C}_i$, $i = 1, \ldots, 5$.

Dla uproszczenia wprowadźmy następujące oznaczenie sumy iloczynu charakterów χ_i i funkcji $f(\alpha_{3\mu})$ ze wzoru (769):

$$\begin{aligned} F(\alpha_{3\mu}) \equiv \chi_1\hat{E}f(\alpha_{3\mu}) &+ \chi_2\hat{C}_{2y}f(\alpha_{3\mu}) + \chi_3\big(\hat{C}_{4y}f(\alpha_{3\mu}) + \hat{C}_{4y}^{-1}f(\alpha_{3\mu})\big) \\ &+\chi_4\big(\hat{C}_{2x}f(\alpha_{3\mu}) + \hat{C}_{2z}f(\alpha_{3\mu})\big) + \chi_5\big(\hat{C}_{2c}f(\alpha_{3\mu}) + \hat{C}_{2d}f(\alpha_{3\mu})\big). \end{aligned} \tag{770}$$

Korzystając z zależności (768) oraz z faktu, że wartości charakterów reprezentacji jednowymiarowych dla klas $\mathcal{C}_1$ i $\mathcal{C}_2$ są równe (tabela 23), funkcję (770) można przedstawić w innej postaci:

$$F(\alpha_{3\mu}) = \chi_1\big(\hat{E}f(\alpha_{3\mu}) + \hat{E}f(-\alpha_{3\mu})\big) + \chi_3\big(\hat{C}_{4y}f(\alpha_{3\mu}) + \hat{C}_{4y}f(-\alpha_{3\mu})\big)$$
$$+\chi_4\big(\hat{C}_{2x}f(\alpha_{3\mu}) + \hat{C}_{2x}f(-\alpha_{3\mu})\big) + \chi_5\big(\hat{C}_{2c}f(\alpha_{3\mu}) + \hat{C}_{2c}f(-\alpha_{3\mu})\big). \quad (771)$$

Zatem działając operatorem inwersji na funkcję $F(\alpha_{3\mu})$ otrzymujemy równość $\hat{I}F(\alpha_{3\mu}) = F(-\alpha_{3\mu})$. Oznacza to, że otrzymane funkcje po zrzutowaniu na jednowymarowe reprezentacje grupy $\overline{D}_{4;y}$ mają parzystość dodatnią.

Podobnie można zobaczyć co się dzieje z funkcjami uzyskanymi dla reprezentacji dwuwymiarowej E. W tym przypadku za pomocą operatora rzutowego zależnego od elementów macierzy reprezentacji otrzymujemy dwie funkcje bazowe. Działanie operatora rzutowego na funkcje początkowe $f(\alpha_{3\mu})$ dla pierwszego wektora bazowego reprezentacji E ma postać:

$$f_1(\alpha_{3\mu}) \equiv \overline{P}^E_{11}f(\alpha_{3\mu}) = W \sum_{\overline{g}\in\overline{D}_{4;y}} \Delta^E_{11}(\overline{g})^*\overline{g}f(\alpha_{3\mu}) \quad (772)$$

a dla drugiego wektora:

$$f_2(\alpha_{3\mu}) \equiv \overline{P}^E_{21}f_1(\alpha_{3\mu}) = W \sum_{\overline{g}\in\overline{D}_{4;y}} \Delta^E_{21}(\overline{g})^*\overline{g}f_1(\alpha_{3\mu}), \quad (773)$$

gdzie $W = \frac{\dim(E)}{\mathrm{card}(\overline{D}_{4;y})} = \frac{1}{4}$.

Podobnie jak dla reprezentacji jednowymiarowych przyjmijmy następujące znaczenia:

$$f_1(\alpha_{3\mu}) = \textstyle\sum_{\overline{g}\in\overline{D}_{4;y}} \Delta^E_{11}(\overline{g})^*\overline{g}f(\alpha_{3\mu}), \quad (774)$$
$$f_2(\alpha_{3\mu}) = \textstyle\sum_{\overline{g}\in\overline{D}_{4;y}} \Delta^E_{21}(\overline{g})^*\overline{g}f_1(\alpha_{3\mu}). \quad (775)$$

Rozpisując powyższe sumy i korzystając z postaci macierzy reprezentacji ([2]) otrzymujemy:

$$f_1(\alpha_{3\mu}) = \textstyle\sum_{\overline{g}\in\overline{D}_{4;y}} \Delta^E_{11}(\overline{g})^*\overline{g}f(\alpha_{3\mu}) \quad (776)$$
$$= \hat{E}f(\alpha_{3\mu}) - \hat{C}_{2y}f(\alpha_{3\mu}) + \hat{C_{2x}}f(\alpha_{3\mu}) - \hat{C}_{2z}f(\alpha_{3\mu})$$
$$= \hat{E}f(\alpha_{3\mu}) - \hat{E}f(-\alpha_{3\mu}) + \hat{C_{2x}}f(\alpha_{3\mu}) - \hat{C}_{2x}f(-\alpha_{3\mu})$$

oraz

$$f_2(\alpha_{3\mu}) = \textstyle\sum_{\overline{g}\in\overline{D}_{4;y}} \Delta^E_{21}(\overline{g})^*\overline{g}f_1(\alpha_{3\mu})$$
$$= \hat{C}_{2c}f_1(\alpha_{3\mu}) - \hat{C}_{2d}f_1(\alpha_{3\mu}) - \hat{C}_{4y}f_1(\alpha_{3\mu}) - \hat{C}^{-1}_{4y}f_1(\alpha_{3\mu})$$
$$= \hat{C}_{2c}\big(f_1(\alpha_{3\mu}) - f_1(-\alpha_{3\mu})\big) + \hat{C}_{4y}\big(f_1(\alpha_{3\mu}) - f_1(-\alpha_{3\mu})\big).$$

Oznacza to, że funkcje bazowe otrzymane przez rzut na reprezentacje E mają parzystość ujemną.

Zatem już przy samym rzucie automatycznie działanie grupy oraz jej własności pozwalają uzyskać funkcję o odpowiedniej parzystości.

G Operator dipolowy i kwadrupolowy

W tej części przedstawione są wzory oraz wyprowadzenia wykorzystywanych operatorów: kwadrupolowego $\hat{Q}_{2\mu}$ i oktupolowego $\hat{Q}_{1\mu}$. Operatory te zostały użyte do obliczeń zredukowanych prawdopodobieństw przejść wewnątrz i międzypasmowych. Postać otrzymanych operatorów zależy od wyboru zmiennych wewnętrznych wykorzystywanych do opisu przestrzeni opisującej ruch wibracyjny. Dodatkowo wybór zmiennych kolektywnych wpływa na postać grupy symetryzacji, a zatem również na rozkład omawianych operatorów na nieprzywiedlne operatory tensora względem grupy $\overline{G}_s$.

Wykorzystywana w pracy postać operatora multipolowego w układzie wewnętrznym dana jest wzorem [52]:

$$\hat{Q}_{\lambda\mu} = \tfrac{3ZR_0^\lambda}{4\pi}\Big\{\alpha_{\lambda\mu} + \tfrac{\lambda+2}{4\sqrt{\pi}}\textstyle\sum_{\lambda_1,\lambda_2}\sqrt{\tfrac{(2\lambda_1+1)(2\lambda_2+1)}{2\lambda+1}}(\lambda_1 0\lambda_2 0|\lambda 0)(\alpha_{\lambda_1}\otimes\alpha_{\lambda_2})_{\lambda\mu}\Big\},$$
$$(\alpha_{\lambda_1}\otimes\alpha_{\lambda_2})_{\lambda\mu} = \textstyle\sum_{\mu_1,\mu_2}(\lambda_1\mu_1\lambda_2\mu_2|\lambda\mu)\alpha_{\lambda_1\mu_1}\alpha_{\lambda_2\mu_2}. \qquad (777)$$

Dla wybranych dwóch grup symetryzacji $\overline{G}_s = \overline{O}, \overline{D}_{4;y}$ używanych w pracy otrzymujemy następującą postać składowych operatorów dipolowego i kwadrupolowego:

(i) Dla operatora dipolowego:

(a) W modelu o zmiennych zespolonych (Z), gdzie zmiennymi opisującymi ruch wibracyjny są zmienne kwadrupolowe α_{20}, α_{22} i oktupolowe $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{32}, \alpha'_{33}, \alpha''_{31}, \alpha''_{32}, \alpha''_{33}$, gdzie $\alpha_{3\mu} = \alpha'_{3\mu} + i\alpha''_{3\mu}$, $\mu = 0, \pm1, \pm2, \pm3$ oraz $\alpha^*_{\lambda\mu} = (-1)^\mu\alpha_{\lambda-\mu}$ mamy:

$$\begin{aligned}\hat{Q}_{10} &= \tfrac{3ZR_0}{4\pi}\tfrac{3}{2}\sqrt{\tfrac{3}{7\pi}}\Big\{\alpha_{22}\alpha_{3-2} + \tfrac{3}{\sqrt{5}}\alpha_{20}\alpha_{30} + \alpha_{22}\alpha_{32}\Big\}\\ &= \tfrac{3ZR_0}{4\pi}\tfrac{3}{2}\sqrt{\tfrac{3}{7\pi}}\Big\{2\alpha_{22}\alpha'_{32} + \tfrac{3}{\sqrt{5}}\alpha_{20}\alpha_{30}\Big\}, \qquad (778)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{Q}_{11} &= \tfrac{3ZR_0}{4\pi}\tfrac{3}{2}\sqrt{\tfrac{3}{7\pi}}\Big\{\tfrac{1}{\sqrt{5}}\alpha_{22}\alpha_{3-1} + \sqrt{\tfrac{6}{5}}\alpha_{20}\alpha_{31} + \sqrt{3}\alpha_{22}\alpha_{33}\Big\}\\ &= \tfrac{3ZR_0}{4\pi}\tfrac{3}{2}\sqrt{\tfrac{3}{7\pi}}\Big\{\alpha'_{31}\big(-\tfrac{1}{\sqrt{5}}\alpha_{22} + \sqrt{\tfrac{6}{5}}\alpha_{20}\big) + i\alpha''_{31}\big(\tfrac{1}{\sqrt{5}}\alpha_{22} + \sqrt{\tfrac{6}{5}}\alpha_{20}\big)\\ &\quad + \sqrt{3}\alpha_{22}\big(\alpha'_{33} + i\alpha''_{33}\big)\Big\}, \qquad (779)\end{aligned}$$

$$\hat{Q}_{1-1} = \tfrac{3ZR_0}{4\pi}\tfrac{3}{2}\sqrt{\tfrac{3}{7\pi}}\Big\{\tfrac{1}{\sqrt{5}}\alpha_{22}\alpha_{31} + \sqrt{\tfrac{6}{5}}\alpha_{20}\alpha_{3-1} + \sqrt{3}\alpha_{22}\alpha_{3-3}\Big\}$$
$$= \tfrac{3ZR_0}{4\pi}\tfrac{3}{2}\sqrt{\tfrac{3}{7\pi}}\Big\{\alpha'_{31}\big(\tfrac{1}{\sqrt{5}}\alpha_{22} - \sqrt{\tfrac{6}{5}}\alpha_{20}\big) + i\alpha''_{31}\big(\tfrac{1}{\sqrt{5}}\alpha_{22} + \sqrt{\tfrac{6}{5}}\alpha_{20}\big)$$
$$-\sqrt{3}\alpha_{22}\big(\alpha'_{33} - i\alpha''_{33}\big)\Big\}. \quad (780)$$

Rzutując powyższe składowe operatora dipolowego na nieprzywiedlne reprezentacje grupy symetyzacji $\overline{O}$ otrzymujemy, że każdy z operatorów $\hat{Q}_{10}$, $\hat{Q}_{1\pm1}$ należy do reprezentacji T_1, co można zapisać jako: $\hat{Q}_{1\pm1} = \hat{Q}^{T_1}_{1\pm1}$, $\hat{Q}_{10} = \hat{Q}^{T_1}_{10}$.
Ponieważ powyższe operatory składają się z kombinacji liniowych iloczynów zmiennej kwadrupolowej i oktupolowej można je ogólnie zapisać następująco:

$$\hat{Q}_{1\mu} = \sum_{\mu_2,\mu_3} c^{\mu_2\mu_3}_{1\mu}\alpha_{2\mu_2}\alpha_{3\mu_3}, \quad (781)$$

gdzie $c^{\mu_2\mu_3}_{1\mu}$ oznaczają wpółczynniki stojące przy poszczególnych iloczynach zmiennych $\alpha_{2\mu_2}\alpha_{3\mu_3}$. Ponieważ nie uwzględniamy deformacji dipolowej $\alpha_{1\mu}$, zatem w operatorze dipolowym nie występuje człon liniowy.

Korzystając z powyższego wzoru można rozłożyć składowe operatora dipolowego na tensory względem grupy symetryzacji $\overline{G}_s$ zgodnie z łańcuchem grupowym $\overline{G}_s \subset \overline{SO(3)} \subset \overline{G}_{\alpha_2} \times \overline{G}_{\alpha_3} \times \overline{SO(3)}_{\Omega}$. W tym celu potrzebna jest znajomość reprezentacji, do których należą występujące w $\hat{Q}_{10}, \hat{Q}_{1\pm1}$ zmienne kwadrupolowe i oktupolowe.

Dla grupy symetryzacji $\overline{O}$ otrzymujemy następujące niezerowe rzuty na nieprzywiedlne reprezentacje zmiennych opisujących ruch wibracyjny:

$$P^E\alpha_{20} = \alpha_{20},$$
$$P^E\alpha_{22} = \alpha_{22}, \quad (782)$$

$$P^{T_1}\alpha_{30} = \alpha_{30},$$
$$P^{T_2}\alpha_{32} = \alpha_{32}, \quad (783)$$

$$P^{T_1}\alpha'_{31} = \tfrac{1}{8}\Big\{3\alpha'_{31} - \sqrt{15}\alpha'_{33}\Big\},$$
$$P^{T_2}\alpha'_{31} = \tfrac{1}{8}\Big\{5\alpha'_{31} + \sqrt{15}\alpha'_{33}\Big\}, \qquad (784)$$

$$P^{T_1}\alpha'_{33} = \tfrac{1}{8}\Big\{\sqrt{15}\alpha'_{31} + 3\alpha'_{33}\Big\},$$
$$P^{T_2}\alpha'_{33} = \tfrac{1}{8}\Big\{-\sqrt{15}\alpha'_{31} + 5\alpha'_{33}\Big\}, \qquad (785)$$

$$P^{T_1}\alpha''_{31} = \tfrac{1}{8}\Big\{3\alpha''_{31} + \sqrt{15}\alpha''_{33}\Big\},$$
$$P^{T_2}\alpha''_{31} = \tfrac{1}{8}\Big\{5\alpha''_{31} - \sqrt{15}\alpha''_{33}\Big\}, \qquad (786)$$

$$P^{T_1}\alpha''_{33} = \tfrac{1}{8}\Big\{\sqrt{15}\alpha''_{31} + 5\alpha''_{33}\Big\},$$
$$P^{T_2}\alpha''_{33} = \tfrac{1}{8}\Big\{-\sqrt{15}\alpha''_{31} + 3\alpha''_{33}\Big\}. \qquad (787)$$

Zatem składowe operatora dipolowego można ogólnie zapisać:

$$\hat{Q}_{1\mu} = \sum_{\mu_2=0,2}\sum_{\mu_3=-3}^{3} c_{1\mu}^{\mu_2\mu_3}\alpha^{E}_{2\mu_2}\Big\{\alpha^{T_1}_{3\mu_3} + \alpha^{T_2}_{3\mu_3}\Big\}, \qquad (788)$$
$$\mu = 0, \pm 1,$$

gdzie część opisana zmiennymi kwadrupolowymi należy do reprezentacji dwuwymiarowej E, a oktupolowa rozkłada się na dwie reprezentacje trójwymiarowe T_1 i T_2.

(b) W modelu o zmiennych rzeczywistych (R), gdzie zmiennymi kwadrupolowymi są α_{20}, α_{22}, a oktupolowymi $\alpha_{30}, \alpha'_{31}, \alpha'_{32}, \alpha'_{33}$ otrzymujemy:

$$\hat{Q}_{10} = \frac{3ZR_0}{4\pi}\frac{3}{2}\sqrt{\frac{3}{7\pi}}\Big\{2\alpha_{22}\alpha'_{32} + \frac{3}{\sqrt{5}}\alpha_{20}\alpha_{30}\Big\}, \qquad (789)$$

$$\hat{Q}_{11} = \frac{3ZR_0}{4\pi}\frac{3}{2}\sqrt{\frac{3}{7\pi}}\Big\{\frac{1}{\sqrt{5}}\alpha'_{31}\big(-\alpha_{22} + \sqrt{6}\alpha_{20}\big) + \sqrt{3}\alpha_{22}\alpha'_{33}\Big\}, \qquad (790)$$

$$\hat{Q}_{1-1} = \frac{3ZR_0}{4\pi}\frac{3}{2}\sqrt{\frac{3}{7\pi}}\Big\{\frac{1}{\sqrt{5}}\alpha'_{31}\big(\alpha_{22} - \sqrt{6}\alpha_{20}\big) - \sqrt{3}\alpha_{22}\alpha'_{33}\Big\}. \tag{791}$$

Z powyższych wzorów widać, że dla zmiennych rzeczywistych $\hat{Q}_{11} = -\hat{Q}_{1-1}$, a zatem każdy z powyższych operatorów należy do dwuwymiarowej reprezentacji $\overline{D}_{4;y}$, co oznaczamy $\hat{Q}_{1\mu} = \hat{Q}^E_{1\mu}$, $\mu = 0, \pm 1$. Niezerowe rzuty zmiennych kwadrupolowych i oktupolowych na nieprzywiedlne reprezentacje grupy $\overline{D}_{4;y}$ są następujące:

$$\begin{aligned} P^{A_1}\alpha_{20} &= \tfrac{1}{8}\big(\alpha_{20} + \sqrt{6}\alpha_{22}\big), \\ P^{B_1}\alpha_{20} &= \tfrac{1}{8}\big(3\alpha_{20} - \sqrt{6}\alpha_{22}\big), \end{aligned} \tag{792}$$

$$\begin{aligned} P^{A_1}\alpha_{22} &= \tfrac{1}{4}\big(\sqrt{6}\alpha_{20} + 6\alpha_{22}\big), \\ P^{B_1}\alpha_{22} &= \tfrac{1}{4}\big(- \sqrt{6}\alpha_{20} + 2\alpha_{22}\big), \end{aligned} \tag{793}$$

$$\begin{aligned} P^{E}\alpha_{30} &= \alpha_{30}, \\ P^{E}\alpha'_{3\mu} &= \alpha'_{3\mu}, \quad \mu = 1, 2, 3. \end{aligned} \tag{794}$$

Pozwala to zapisać składowe operatora dipolowego jako:

$$\begin{gathered} \hat{Q}_{1\mu} = \textstyle\sum_{\mu_2,\mu_3} c^{\mu_2\mu_3}_{1\mu}\Big\{\alpha^{A_1}_{2\mu_2} + \alpha^{B_1}_{2\mu_2}\Big\}\alpha^{E}_{3\mu_3}, \\ \mu = 0, \pm 1, \end{gathered} \tag{795}$$

gdzie część kwadrupolowa rozkłada się na dwie reprezentacje jednowymiarowe A_1 i B_1, a część oktupolowa należy do reprezentacji dwuwymiarowej E.

(ii) Składowe operatora kwadrupolowego w zmiennych kwadrupolowych i oktupolowych można ogólnie zapisać w postaci:

$$\hat{Q}_{2\mu'} = c_{2\mu'}\alpha_{2\mu'} + \sum_{\mu_2,\mu'_2} c^{\mu_2\mu'_2}_{2\mu'}\alpha_{2\mu_2}\alpha_{2\mu'_2} + \sum_{\mu_3,\mu'_3} d^{\mu_3\mu'_3}_{2\mu'}\alpha_{3\mu_3}\alpha_{3\mu'_3}. \tag{796}$$

Jak widać można je rozbić na dwa składniki: zależny jedynie od zmiennych kwadrupolowych oraz opisany przez zmienne oktupolowe. W tym celu zostały wprowadzone następujące oznaczenia:

$$\begin{aligned} \hat{Q}^{kw}_{2\mu'} &= c_{2\mu'}\alpha_{2\mu'} + \textstyle\sum_{\mu_2,\mu'_2} c^{\mu_2\mu'_2}_{2\mu'}\alpha_{2\mu_2}\alpha_{2\mu'_2}, \\ \hat{Q}^{ok}_{2\mu'} &= \textstyle\sum_{\mu_3,\mu'_3} d^{\mu_3\mu'_3}_{2\mu'}\alpha_{3\mu_3}\alpha_{3\mu'_3}, \end{aligned} \tag{797}$$

gdzie $c_{2\mu'}$, $c^{\mu_2\mu'_2}_{2\mu'}$, $d^{\mu_3\mu'_3}_{2\mu'}$ są odpowiednimi współczynnikami.

Korzystając z powyższego wzoru każdy ze składników możemy zrzutować na nieprzywiedlną reprezentację grupy symetryzacji. Uzyskujemy w ten sposób rozkład na reprezentacje części operatora opisanego tylko przez zmienne kwadrupolowe $\hat{Q}^{kw}_{2\mu'}$ oraz oktupolowe $\hat{Q}^{ok}_{2\mu'}$. Otrzymane rozkłady możemy ogólnie zapisać następująco:

$$\begin{aligned} \hat{Q}^{kw}_{2\mu'} &= \textstyle\sum_{\Gamma^{(2)}} \hat{Q}^{\Gamma^{(2)}\ kw}_{2\mu'}, \\ \hat{Q}^{ok}_{2\mu'} &= \textstyle\sum_{\Gamma^{(3)}} \hat{Q}^{\Gamma^{(3)}\ ok}_{2\mu'}, \end{aligned} \tag{798}$$

gdzie $\Gamma^{(2)}$ jest reprezentacją względem, której transformuje się część operatora $\hat{Q}_{2\mu'}$ zapisana w zmiennych kwadrupolowych, a $\Gamma^{(3)}$ w zmiennych oktupolowych.

(a) W modelu (Z) rozkład składowych operatora kwadrupolowego na nieprzywiedlne reprezentacje ma postać:

$$\hat{Q}_{20} = \hat{Q}^{E,kw}_{20} + \hat{Q}^{E,ok}_{20}, \tag{799}$$

gdzie:

$$\hat{Q}^{E,kw}_{20} = \tfrac{3ZR_0^2}{4\pi}\Big\{\alpha_{20} + \tfrac{1}{\sqrt{5\pi}}\Big[\tfrac{10}{7}\alpha^2_{20} - \tfrac{20}{7}\alpha^2_{22}\Big]\Big\}, \tag{800}$$

$$\begin{aligned} \hat{Q}^{E,ok}_{20} &= \tfrac{3ZR_0^2}{4\pi}\tfrac{1}{\sqrt{5\pi}}\Big\{\tfrac{4}{3}\alpha^2_{30} - 2\alpha_{3-1}\alpha_{31} + \tfrac{10}{3}\alpha_{3-3}\alpha_{33}\Big\} \\ &= \tfrac{3ZR_0^2}{4\pi}\tfrac{1}{\sqrt{5\pi}}\Big\{\tfrac{4}{3}\alpha^2_{30} + 2\big(\alpha'^2_{31} + \alpha''^2_{31}\big) - \tfrac{10}{3}\big(\alpha'^2_{33} + \alpha''^2_{33}\big)\Big\}, \end{aligned} \tag{801}$$

$$\hat{Q}_{22} = \hat{Q}_{22}^{E,kw} + \hat{Q}_{22}^{E,ok} + \hat{Q}_{22}^{T_2,ok}, \quad \text{gdzie} \tag{802}$$
$$\hat{Q}_{22}^{E,kw} = \frac{3ZR_0^2}{4\pi}\Big\{\alpha_{22} - \frac{20}{7\sqrt{5\pi}}\alpha_{20}\alpha_{22}\Big\},$$
$$\hat{Q}_{22}^{E,ok} = \frac{3ZR_0^2}{4\pi}\frac{1}{\sqrt{5\pi}}\Big\{\sqrt{\tfrac{2}{3}}\big(\alpha_{3-1}^2 + \alpha_{31}^2\big) - \tfrac{2}{3}\sqrt{5}\alpha_{30}\big(\alpha_{3-2} + \alpha_{32}\big)$$
$$+\tfrac{\sqrt{10}}{3}\big(\alpha_{3-3}\alpha_{31} + \alpha_{3-1}\alpha_{33}\big)\Big\}$$
$$= \frac{3ZR_0^2}{4\pi}\frac{1}{\sqrt{5\pi}}\Big\{2\sqrt{\tfrac{2}{3}}\big(\alpha_{31}'^2 - \alpha_{31}''^2\big) - \tfrac{4}{3}\sqrt{5}\alpha_{30}\alpha_{32}'$$
$$-2\tfrac{\sqrt{10}}{3}\big(\alpha_{31}'\alpha_{33}' + \alpha_{31}''\alpha_{33}''\big)\Big\},$$
$$\hat{Q}_{22}^{T_2,ok} = \frac{3ZR_0^2}{4\pi}\frac{1}{\sqrt{5\pi}}\Big\{\sqrt{\tfrac{2}{3}}\big(-\alpha_{3-1}^2 + \alpha_{31}^2\big) - \tfrac{2}{3}\sqrt{5}\alpha_{30}\big(-\alpha_{3-2} + \alpha_{32}\big)$$
$$+\tfrac{\sqrt{10}}{3}\big(-\alpha_{3-3}\alpha_{31} + \alpha_{3-1}\alpha_{33}\big)\Big\}$$
$$= \frac{3ZR_0^2}{4\pi}\frac{i}{\sqrt{5\pi}}\Big\{4\sqrt{\tfrac{2}{3}}\alpha_{31}'\alpha_{31}'' - \tfrac{4}{3}\sqrt{5}\alpha_{30}\alpha_{32}''$$
$$+2\tfrac{\sqrt{10}}{3}\big(\alpha_{31}''\alpha_{33}' - \alpha_{31}'\alpha_{33}''\big)\Big\}$$

oraz

$$\hat{Q}_{22}^{E,kw} = \hat{Q}_{2-2}^{E,kw},$$
$$\hat{Q}_{22}^{E,ok} = \hat{Q}_{2-2}^{E,ok},$$
$$\hat{Q}_{22}^{T_2,ok} = -\hat{Q}_{2-2}^{T_2,ok},$$

$$\hat{Q}_{21} = \hat{Q}_{21}^{T_2,ok}, \tag{803}$$
gdzie
$$\hat{Q}_{21}^{T_2,ok} = \frac{3ZR_0^2}{4\pi}\frac{1}{\sqrt{5\pi}}\Big\{\tfrac{2}{3}\sqrt{2}\alpha_{30}\alpha_{31} - 2\sqrt{\tfrac{5}{3}}\alpha_{3-1}\alpha_{32} + \tfrac{10}{3}\alpha_{3-2}\alpha_{33}\Big]\Big\}$$
$$= \frac{3ZR_0^2}{4\pi}\frac{1}{\sqrt{5\pi}}\Big\{\tfrac{2}{3}\sqrt{2}\alpha_{30}\big(\alpha_{31}' + i\alpha_{31}''\big)$$
$$+2\sqrt{\tfrac{5}{3}}\big(\alpha_{31}'\alpha_{32}' + i\alpha_{31}'\alpha_{32}'' - i\alpha_{31}''\alpha_{32}' + \alpha_{31}''\alpha_{32}''\big)$$
$$+\tfrac{10}{3}\big(\alpha_{32}'\alpha_{33}' + i\alpha_{32}'\alpha_{33}'' - i\alpha_{32}''\alpha_{33}' + \alpha_{32}''\alpha_{33}''\big)\Big]\Big\},$$

$$\hat{Q}_{2-1} = \hat{Q}_{2-1}^{T_2,ok}, \tag{804}$$
gdzie
$$\hat{Q}_{2-1}^{T_2,ok} = -\big(\hat{Q}_{21}^{T_2,ok}\big)^*.$$

(b) w modelu (R) rozkład na nieprzywiedlne reprezentacje grupy symetryzcji $\overline{D}_{4;y}$ składowych operatora kwadrupolowego jest następujący:

$$\hat{Q}_{20} = \hat{Q}_{20}^{A_1,kw} + \hat{Q}_{20}^{B_1,kw} + \hat{Q}_{20}^{A_1,ok} + \hat{Q}_{20}^{B_1,ok}, \qquad (805)$$

gdzie

$$\begin{aligned}
\hat{Q}_{20}^{A_1,kw} &= \tfrac{3ZR_0^2}{4\pi}\Big\{\tfrac{1}{4}\alpha_{20} + \tfrac{1}{14}\sqrt{\tfrac{5}{\pi}}\alpha_{20}^2 + \tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{3}{2}}\alpha_{22} \\
&\quad -\tfrac{1}{7}\sqrt{\tfrac{30}{\pi}}\alpha_{20}\alpha_{22} - \tfrac{1}{7}\sqrt{\tfrac{5}{\pi}}\alpha_{22}^2\Big\}, \\
\hat{Q}_{20}^{B_1,kw} &= \tfrac{3ZR_0^2}{4\pi}\Big\{\tfrac{3}{4}\alpha_{20} + \tfrac{3}{14}\sqrt{\tfrac{5}{\pi}}\alpha_{20}^2 - \tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{3}{2}}\alpha_{22} \\
&\quad +\tfrac{1}{7}\sqrt{\tfrac{30}{\pi}}\alpha_{20}\alpha_{22} - \tfrac{3}{7}\sqrt{\tfrac{5}{\pi}}\alpha_{22}^2\Big\}, \\
\hat{Q}_{20}^{A_1,ok} &= \tfrac{3ZR_0^2}{4\pi}\tfrac{1}{\sqrt{5\pi}}\Big\{\tfrac{1}{3}\alpha_{30}^2 + \tfrac{3}{2}\alpha_{31}^{\prime\,2} - \sqrt{\tfrac{10}{3}}\alpha_{30}\alpha'_{32} \\
&\quad -\sqrt{\tfrac{5}{3}}\alpha'_{31}\alpha'_{33} - \tfrac{5}{6}\alpha_{33}^{\prime\,2}\Big\}, \\
\hat{Q}_{20}^{B_1,ok} &= \tfrac{3ZR_0^2}{4\pi}\tfrac{1}{\sqrt{5\pi}}\Big\{\alpha_{30}^2 + \tfrac{1}{2}\alpha_{31}^{\prime\,2} + \sqrt{\tfrac{10}{3}}\alpha_{30}\alpha'_{32} \\
&\quad +\sqrt{\tfrac{5}{3}}\alpha'_{31}\alpha'_{33} - \tfrac{5}{2}\alpha_{33}^{\prime\,2}\Big\},
\end{aligned} \qquad (806)$$

$$\begin{aligned}
\hat{Q}_{22} &= \tfrac{3ZR_0^2}{4\pi}\Big\{\alpha_{22} + \tfrac{1}{\sqrt{5\pi}}\Big[-\tfrac{20}{7}\alpha_{20}\alpha_{22} \\
&\quad +2\sqrt{\tfrac{2}{3}}\alpha_{31}^{\prime 2} - \tfrac{4}{3}\sqrt{5}\alpha_{30}\alpha'_{32} - \tfrac{2}{3}\sqrt{10}\alpha'_{31}\alpha'_{33}\Big]\Big\},
\end{aligned} \qquad (807)$$

$$\hat{Q}_{22} = \hat{Q}_{22}^{A_1,kw} + \hat{Q}_{22}^{B_1,kw} + \hat{Q}_{22}^{A_1,ok} + \hat{Q}_{22}^{B_1,ok}, \qquad (808)$$

gdzie

$$\begin{aligned}
\hat{Q}_{22}^{A_1,kw} &= \tfrac{3ZR_0^2}{4\pi}\Big\{\tfrac{1}{4}\sqrt{\tfrac{3}{2}}\alpha_{20} + \tfrac{1}{14}\sqrt{\tfrac{15}{2\pi}}\alpha_{20}^2 \\
&\quad +\tfrac{3}{4}\alpha_{22} - \tfrac{3}{7}\sqrt{\tfrac{5}{\pi}}\alpha_{20}\alpha_{22} - \tfrac{1}{7}\sqrt{\tfrac{15}{2\pi}}\alpha_{22}^2\Big\}, \\
\hat{Q}_{22}^{B_1,kw} &= \tfrac{3ZR_0^2}{4\pi}\Big\{-\tfrac{1}{4}\sqrt{\tfrac{3}{2}}\alpha_{20} - \tfrac{1}{14}\sqrt{\tfrac{15}{2\pi}}\alpha_{20}^2 \\
&\quad +\tfrac{1}{4}\alpha_{22} - \tfrac{1}{7}\sqrt{\tfrac{5}{\pi}}\alpha_{20}\alpha_{22} + \tfrac{1}{7}\sqrt{\tfrac{15}{2\pi}}\alpha_{22}^2\Big\},
\end{aligned}$$

$$\hat{Q}_{22}^{A_1,ok} = \tfrac{3ZR_0^2}{4\pi}\tfrac{1}{\sqrt{5\pi}}\Big\{\tfrac{1}{\sqrt{6}}\alpha_{30}^2 + \tfrac{3}{2}\sqrt{\tfrac{3}{2}}\alpha_{31}^{\prime\,2} - \sqrt{5}\alpha_{30}\alpha'_{32}$$
$$-\sqrt{\tfrac{5}{2}}\alpha'_{31}\alpha'_{33} - \tfrac{5}{2\sqrt{6}}\alpha_{33}^{\prime\,2}\Big\},$$
$$\hat{Q}_{22}^{B_1,ok} = \tfrac{3ZR_0^2}{4\pi}\tfrac{1}{\sqrt{5\pi}}\Big\{-\tfrac{1}{\sqrt{6}}\alpha_{30}^2 - \tfrac{1}{2\sqrt{6}}\alpha_{31}^{\prime\,2} - \tfrac{\sqrt{5}}{3}\alpha_{30}\alpha'_{32}$$
$$-\tfrac{1}{3}\sqrt{\tfrac{5}{2}}\alpha'_{31}\alpha'_{33} + \tfrac{5}{2\sqrt{6}}\alpha_{33}^{\prime\,2}\Big\}. \tag{809}$$

Dla operatora $\hat{Q}_{2-2}$ zachodzi równość $\hat{Q}_{2-2} = \hat{Q}_{22}$, zatem również rozkład na reprezentacje jest taki sam jak dla $\hat{Q}_{22}$.
Operator $\hat{Q}_{21}$ ma postać:

$$\hat{Q}_{21} = \frac{3ZR_0^2}{4\pi}\frac{1}{\sqrt{5\pi}}\Big\{\frac{2}{3}\sqrt{2}\alpha_{30}\alpha'_{31} + 2\sqrt{\frac{5}{3}}\alpha'_{31}\alpha'_{32} + \frac{10}{3}\alpha'_{32}\alpha'_{33}\Big\} \tag{810}$$

i należy do reprezentacji jednowymiarowej B_2, co można zapisać jako:

$$\hat{Q}_{21} = \hat{Q}_{21}^{B_2,ok}. \tag{811}$$

Ponieważ operatory zbudowane są ze zmiennych rzeczywistych mamy zależności:

$$\hat{Q}_{2-1} = \hat{Q}_{2-1}^{B_2,ok}, \tag{812}$$
gdzie
$$\hat{Q}_{2-1}^{B_2,ok} = -\hat{Q}_{21}^{B_2,ok}.$$

H Elementy macierzowe operatorów multipolowych

Do analizy przejść elektromagnetycznych wykorzystujemy algebraiczne postacie elementów macierzowych stanów składających się z sum iloczynów trzech funkcji $\psi_{vib2}^{\Gamma_{1;\kappa_1}}(\alpha_{20}, \alpha_{22})$, $\psi_{vib3}^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}(\{\alpha_{3\mu}\})$, $R_{\Gamma_{3;\kappa_3}}^{JM}(\Omega)$ zależących odpowiednio od zmiennych kwadrupolowych α_{20}, α_{22}, oktupolowych $\alpha_{3\mu}$, $\mu = 0, \pm1, \pm2, \pm3$ i kątów Eulera $\Omega = (\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)$. Ogólną postać stanu o momencie pędu J i parzystości p można zapisać za pomocą wzoru przedstawionego w dodatku D:

$$\Phi_\nu^{J^pM} = \sum_A \Psi_{\nu A}^{J^pM}, \tag{813}$$

gdzie funkcje pomocnicze $\Psi^{J^pM}_{\nu A}$ mają postać:

$$\Psi^{J^pM}_{\nu A} = \sum_a w_a^{\nu A}\psi^{\Gamma_{1;\kappa_1}}_{vib2;a_1}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi^{\Gamma_{2;\kappa_2}}_{vib3;a_2}(\{\alpha_{3\mu}\})R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3};a_3}(\Omega) \qquad (814)$$

oraz $R^{JM}_{\Gamma_{3;\kappa_3}}(\Omega) = \sum_{K''} b_{K''} r^J_{MK''}(\Omega)$ i $a = (a_1, a_2, a_3)$.

Ponieważ funkcje bazowe opisujące część rotacyjną składają się z kombinacji liniowych $r^{(+)J}_{MK}(\Omega)$ albo $r^{(-)J}_{MK}(\Omega)$ powyższy wzór można zapisać następująco:

$$\Psi^{(+)J^pM}_{\nu A} = \sum_a w_a^{\nu A}\psi^{\Gamma_{1;\kappa_1}}_{vib2;a_1}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}_{vib3;a_2}(\{\alpha_{3\mu}\})\sum_K c_K r^{(+)J}_{MK}(\Omega) \qquad (815)$$

oraz

$$\Psi^{(-)J^pM}_{\nu A} = \sum_a w_a^{\nu A}\psi^{\Gamma_{1;\kappa_1}}_{vib2;a_1}(\alpha_{20},\alpha_{22})\psi^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}_{vib3;a_2}(\{\alpha_{3\mu}\})\sum_K d_K r^{(-)J}_{MK}(\Omega), \qquad (816)$$

gdzie c^{JM}_l, d^{JM}_l oznaczają współczynniki występujące w części rotacyjnej stojące przy funkcjach $r^{(\pm)J}_{MK}(\Omega)$.

Oprócz funkcji opisującej stan początkowy i końcowy zapisanych w kolektywnych zmiennych wewnętrznych potrzebna jest znajomość postaci operatorów multipolowych w układzie laboratoryjnym. Związek pomiędzy operatorami w obu układach jest dany wzorem, (rozdział 6.3):

$$\hat{Q}^{lab}_{\lambda\mu} = \sum_{\mu'=-\lambda}^{\lambda} \hat{Q}_{\lambda\mu'} D^{\lambda}_{\mu\mu'}(\Omega)^*. \qquad (817)$$

Istnieją cztery schematy elementów macierzowych dla funkcji (815) i (816) różniące się wyborem funkcji początkowej i końcowej:

(1) W przypadku, gdy stan początkowy o momencie pędu J w części rotacyjnej ma postać $\sum_K c_K r^{(+)J}_{MK}(\Omega)$, a stan końcowy o momencie pędu J' wybrany jest następująco $\sum_{K'} c'_{K'} r^{(+)J'}_{M'K'}(\Omega)$, wówczas

$$\langle\Phi^{J'^{p'}M'}_{\nu'}|\hat{Q}^{lab}_{\lambda\mu}|\Phi^{J^pM}_{\nu}\rangle = \frac{\big(JM\lambda\mu|J'M'\big)}{\sqrt{2J'+1}}\langle\Phi^{J'^{p'}M'}_{\nu'}||\hat{Q}^{lab}_{\lambda}||\Phi^{J^pM}_{\nu}\rangle.$$

Postać zredukowanego elementu macierzowego $\langle\Phi^{J'^{p'}M'}_{\nu'}||\hat{Q}^{lab}_{\lambda}||\Phi^{J^pM}_{\nu}\rangle$ można otrzymać korzystając z twierdzenia Wignera-Eckarta przedstawionego na stronie 110. Dla przedstawionego powyżej przypadku otrzymujemy:

$$\langle\Phi_{\nu'}^{J'^{p'}M'}||\hat{Q}_{\lambda}^{lab}||\Phi_{\nu}^{J^pM}\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2J+1}{(1+\delta_{0K'})(1+\delta_{0K})}} \tag{818}$$
$$\times\sum_{\mu'}\sum_{A',A}\sum_{a',a} w_{a'}^{\prime\nu' A'\,*} w_a^{\nu A} \sum_{K\geq 0,K'\geq 0} c_{K'}^{\prime *} c_K$$
$$\times\langle\psi_{vib2;a_1'}^{\Gamma_{1;\kappa_1'}'}\psi_{vib3;a_2'}^{p';\Gamma_{2;\kappa_2'}'}|\hat{Q}_{\lambda\mu'}|\psi_{vib2;a_1}^{\Gamma_{1;\kappa_1}}\psi_{vib3;a_2}^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}\rangle$$
$$\times\big\{\big(JK\lambda\mu'|J'K'\big)+\big(J-K\lambda\mu'|J'K'\big)$$
$$+\big(JK\lambda\mu'|J'-K'\big)+\big(J-K\lambda\mu'|J'-K'\big)\big\}.$$

(2) W przypadku, gdy stan początkowy o momencie pędu J ma funkcję rotacyjną w postaci $\sum_K d_K r_{MK}^{(-)J}(\Omega)$ oraz stan końcowy o momencie pędu J': $\sum_{K'} d'_{K'} r_{M'K'}^{(-)J'}(\Omega)$ otrzymujemy zredukowany element macierzowy postaci:

$$\langle\Phi_{\nu'}^{J'^{p'}M'}||\hat{Q}_{\lambda}^{lab}||\Phi_{\nu}^{J^pM}\rangle = 4\pi^2\sqrt{2J+1} \tag{819}$$
$$\times\sum_{\mu'}\sum_{A',A}\sum_{a',a} w_{a'}^{\prime\nu' A'\,*} w_a^{\nu A} \sum_{K>0,K'>0} d_{K'}^{\prime *} d_K$$
$$\times\langle\psi_{vib2;a_1'}^{\Gamma_{1;\kappa_1'}'}\psi_{vib3;a_2'}^{p';\Gamma_{2;\kappa_2'}'}|\hat{Q}_{\lambda\mu'}|\psi_{vib2;a_1}^{\Gamma_{1;\kappa_1}}\psi_{vib3;a_2}^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}\rangle$$
$$\times\big\{\big(JK\lambda\mu'|J'K'\big)-\big(J-K\lambda\mu'|J'K'\big)$$
$$-\big(JK\lambda\mu'|J'-K'\big)+\big(J-K\lambda\mu'|J'-K'\big)\big\}.$$

(3) Dla stanu początkowego o momencie pędu J i o funkcji rotacyjnej $\sum_K d_K r_{MK}^{(-)J}(\Omega)$ oraz stanu końcowego o momencie pędu J': $\sum_{K'} c'_K r_{M'K'}^{(+)J'}(\Omega)$ otrzymujemy następujący zredukowany element macierzowy:

$$\langle\Phi_{\nu'}^{J'^{p'}M'}||\hat{Q}_{\lambda}^{lab}||\Phi_{\nu}^{J^pM}\rangle = 4\pi^2\sqrt{\frac{2J+1}{(1+\delta_{0K'})}} \tag{820}$$
$$\times\sum_{\mu'}\sum_{A',A}\sum_{a',a} w_{a'}^{\prime\nu' A'\,*} w_a^{\nu A} \sum_{K>0,K'\geq 0} c_{K'}^{\prime *} d_K$$
$$\times\langle\psi_{vib2;a_1'}^{\Gamma_{1;\kappa_1'}'}\psi_{vib3;a_2'}^{p';\Gamma_{2;\kappa_2'}'}|\hat{Q}_{\lambda\mu'}|\psi_{vib2;a_1}^{\Gamma_{1;\kappa_1}}\psi_{vib3;a_2}^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}\rangle$$
$$\times\big\{\big(JK\lambda\mu'|J'K'\big)-\big(J-K\lambda\mu'|J'K'\big)$$
$$+\big(JK\lambda\mu'|J'-K'\big)-\big(J-K\lambda\mu'|J'-K'\big)\big\}.$$

(4) Biorąc stan początkowy o momencie pędu J i funkcji rotacyjnej $\sum_K c_K r^{(+)J}_{MK}(\Omega)$ oraz stan końcowy o momencie pędu J': $\sum_{K'} d'_{K'} r^{(-)J'}_{M'K'}(\Omega)$ mamy następujący zredukowany element macierzowy:

$$\begin{aligned}
\langle \Phi^{J'p'M'}_{\nu'} || \hat{Q}^{lab}_{\lambda} || \Phi^{JpM}_{\nu} \rangle &= 4\pi^2 \sqrt{\frac{2J+1}{(1+\delta_{0K})}} \\
&\times \sum_{\mu'} \sum_{A',A} \sum_{a',a} w'^{\nu'A'\,*}_{a'} w^{\nu A}_{a} \sum_{K\geq 0, K'>0} d'^{*}_{K'} c_K \\
&\times \langle \psi^{\Gamma'_{1;\kappa'_1}}_{vib2;a'_1} \psi^{p';\Gamma'_{2;\kappa'_2}}_{vib3;a'_2} | \hat{Q}_{\lambda\mu'} | \psi^{\Gamma_{1;\kappa_1}}_{vib2;a_1} \psi^{p;\Gamma_{2;\kappa_2}}_{vib3;a_2} \rangle \\
&\times \big\{ \big(JK\lambda\mu'|J'K'\big) + \big(J-K\lambda\mu'|J'K'\big) \\
&\quad - \big(JK\lambda\mu'|J'-K'\big) + \big(J-K\lambda\mu'|J'-K'\big) \big\}.
\end{aligned} \tag{821}$$

Powyższe wyrażenia zawierają obliczone wcześniej elementy macierzowe części rotacyjnej oraz wzory na iloczyny funkcji Wignera [49]. Każdy element macierzowy części rotacyjnej składa się z kombinacji wyrażeń:

$$\begin{aligned}
&\langle D^{J'}_{M'K'}(\Omega)^* | D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega)^* | D^{J}_{MK}(\Omega)^* \rangle = \\
&= \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\Omega_1 \int_0^{\pi} d\Omega_2 \, \sin(\Omega_2) \int_0^{2\pi} d\Omega_3 \; D^{J'}_{M'K'}(\Omega) D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega)^* D^{J}_{MK}(\Omega)^*.
\end{aligned} \tag{822}$$

Korzystając z iloczynu dwóch sprzężonych funkcji Wignera [49]:

$$\begin{aligned}
D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega)^* D^{J}_{MK}(\Omega)^* &= (-1)^{-\nu+\mu}(-1)^{-K+M} D^{\lambda}_{-\mu-\nu}(\Omega) D^{J}_{-M-K}(\Omega) \\
&= (-1)^{-\nu+\mu}(-1)^{-K+M} \sum_{J''=|\lambda-J|}^{\lambda+J} \sum_{M'',N''=-J''}^{J''} \big(\lambda-\mu J-M|J''M''\big) \\
&\quad \times \big(\lambda-\nu J-K|J''N''\big) D^{J''}_{M''N''}(\Omega) \\
&= \sum_{J''=|\lambda-J|}^{\lambda+J} \sum_{M'',N''=-J''}^{J''} \big(\lambda-\mu J-M|J''M''\big)\big(\lambda-\nu J-K|J''N''\big) \\
&\quad \times D^{J''}_{-M''-N''}(\Omega)^*
\end{aligned} \tag{823}$$

oraz własności współczynników Clebscha-Gordana [49]:

$$\big(J_1M_1J_2M_2|J_3M_3\big) = (-1)^{J_1+J_2-J_3}\big(J_2M_2J_1M_1|J_3M_3\big), \tag{824}$$

$$\big(J_1M_1J_2M_2|J_3M_3\big) = (-1)^{J_1+J_2-J_3}\big(J_1-M_1J_2-M_2|J_3-M_3\big) \tag{825}$$

i wstawiając (823) do (822) otrzymujemy:

$$\langle D^{J'}_{M'K'}(\Omega)^*|D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega)^*|D^{J}_{MK}(\Omega)^*\rangle = \tag{826}$$

$$= \sum_{J''=|\lambda-J|}^{\lambda+J}\ \sum_{M'',N''=-J''}^{J''} \big(\lambda-\mu J-M|J''M''\big)\big(\lambda-\nu J-K|J''N''\big)$$

$$\times \frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi} d\Omega_1 \int_0^{\pi} d\Omega_2\, \sin(\Omega_2) \int_0^{2\pi} d\Omega_3\; D^{J'}_{M'K'}(\Omega) D^{J''}_{-M''-N''}(\Omega)^*$$

$$= \sum_{J''=|\lambda-J|}^{\lambda+J}\ \sum_{M'',N''=-J''}^{J''} \big(\lambda-\mu J-M|J''M''\big)\big(\lambda-\nu J-K|J''N''\big)$$

$$\times \frac{1}{2J''+1}\delta_{J'J''}\delta_{M'-M''}\delta_{K'-N''}$$

$$= \frac{1}{2J'+1}\big(\lambda-\mu J-M|J'-M'\big)\big(\lambda-\nu J-K|J'-K'\big).$$

Na podstawie powyższych rachunków możemy znaleźć postać elementów macierzowych dla funkcji $r^{(+)J'}_{M'K'}(\Omega)$ i $r^{(-)J'}_{M'K'}(\Omega)$:

1.

$$\langle r^{(+)J'}_{M'K'}(\Omega)|D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega)^*|r^{(+)J}_{MK}(\Omega)\rangle = \tag{827}$$

$$= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{(2J'+1)(2J+1)}{(1+\delta_{0K})(1+\delta_{0K'})}}$$

$$\times\langle D^{J'}_{M'K'}(\Omega)^* + D^{J'}_{M'-K'}(\Omega)^*|D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega)^*|D^{J}_{MK}(\Omega)^* + D^{J}_{M-K}(\Omega)^*\rangle$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{(1+\delta_{0K})(1+\delta_{0K'})}}\sqrt{\frac{2J+1}{2J'+1}}\big(\lambda-\mu J-M|J'-M'\big)$$

$$\times\Big\{\big(\lambda-\nu J-K|J'-K'\big)+\big(\lambda-\nu JK|J'-K'\big)$$

$$+\big(\lambda-\nu J-K|J'K'\big)+\big(\lambda-\nu JK|J'K'\big)\Big\}$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{(1+\delta_{0K})(1+\delta_{0K'})}}\sqrt{\frac{2J+1}{2J'+1}}\big(JM\lambda\mu|J'M'\big)$$

$$\times\Big\{\big(JK\lambda\nu|J'K'\big)+\big(J-K\lambda\nu|J'K'\big)$$

$$+\big(JK\lambda\nu|J'-K'\big)+\big(J-K\lambda\nu|J'-K'\big)\Big\},$$

gdzie $\quad K, K' \geq 0,$

2.

$$
\begin{aligned}
&\langle r^{(-)J'}_{M'K'}(\Omega)|D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega)^*|r^{(-)J}_{MK}(\Omega)\rangle = \qquad (828)\\
&\quad = \frac{1}{2}\sqrt{2J'+1}\sqrt{2J+1}\\
&\quad \times\langle D^{J'}_{M'K'}(\Omega)^* - D^{J'}_{M'-K'}(\Omega)^*|D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega)^*|D^{J}_{MK}(\Omega)^* - D^{J}_{M-K}(\Omega)^*\rangle\\
&\quad = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2J+1}{2J'+1}}\big(JM\lambda\mu|J'M'\big)\\
&\qquad \times\Big\{\big(JK\lambda\nu|J'K'\big) - \big(J-K\lambda\nu|J'K'\big)\\
&\qquad - \big(JK\lambda\nu|J'-K'\big) + \big(J-K\lambda\nu|J'-K'\big)\Big\},
\end{aligned}
$$

gdzie $\quad K, K' > 0,$

3.

$$
\begin{aligned}
&\langle r^{(+)J'}_{M'K'}(\Omega)|D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega)^*|r^{(-)J}_{MK}(\Omega)\rangle = \qquad (829)\\
&\quad = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{(2J'+1)(2J+1)}{(1+\delta_{0K'})}}\\
&\quad \times\langle D^{J'}_{M'K'}(\Omega)^* + D^{J'}_{M'-K'}(\Omega)^*|D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega)^*|D^{J}_{MK}(\Omega)^* - D^{J}_{M-K}(\Omega)^*\rangle\\
&\quad = \frac{1}{2\sqrt{1+\delta_{0K'}}}\sqrt{\frac{2J+1}{2J'+1}}\big(JM\lambda\mu|J'M'\big)\\
&\qquad \times\Big\{\big(JK\lambda\nu|J'K'\big) - \big(J-K\lambda\nu|J'K'\big)\\
&\qquad + \big(JK\lambda\nu|J'-K'\big) - \big(J-K\lambda\nu|J'-K'\big)\Big\},
\end{aligned}
$$

gdzie $\quad K > 0,\ K' \geq 0,$

4.

$$
\begin{aligned}
&\langle r^{(-)J'}_{M'K'}(\Omega)|D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega)^*|r^{(+)J}_{MK}(\Omega)\rangle = \\
&= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{(2J'+1)(2J+1)}{(1+\delta_{0K})}} \\
&\times\langle D^{J'}_{M'K'}(\Omega)^* - D^{J'}_{M'-K'}(\Omega)^*|D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega)^*|D^{J}_{MK}(\Omega)^* + D^{J}_{M-K}(\Omega)^*\rangle \\
&= \frac{1}{2\sqrt{1+\delta_{0K}}}\sqrt{\frac{2J+1}{2J'+1}}\big(JM\lambda\mu|J'M'\big) \\
&\quad\times\Big\{\big(JK\lambda\nu|J'K'\big) + \big(J-K\lambda\nu|J'K'\big) \\
&\quad - \big(JK\lambda\nu|J'-K'\big) - \big(J-K\lambda\nu|J'-K'\big)\Big\},
\end{aligned}
\tag{830}
$$

gdzie $K \geq 0,\ K' > 0.$

Spis rysunków

Spis tablic

Literatura

[1] M Hamermesh, Teoria grup w zastosowaniu do zagadnień fizycznych, PWN, 1968.

[2] J. F. Cornwell, Group theory in physics, Academic Press, 1984.

[3] X. Li, J. Dudek, Phys. Rev. C 49 (1994) R1250.

[4] J. Dudek, A. Góźdź, N.Schunck, M. Miśkiewicz, Phys. Rev. Lett. 88 (2002) 252502-1.

[5] Jentschel M. et al., Rhys. Rev. Lett. 104 (2010) 222502.

[6] korespondencja prywatna, prof. dr hab. A. Góźdź.

[7] J.-Q. Chen, M.-J. Gao, G.-Q. Ma, Rev. Mod. Phys. 57 (1985) 211.

[8] J.-Q. Chen, J. Ping, F. Wang, Group representation theory for physicists, World Scientific, 2002.

[9] P. W. Atkins, M. S. Child, C. S. G. Phillips, Tables for Group Theory, Oxford University Press, 1990.

[10] G. F. Koster, J. O. Dimmock, R. G. Wheeler, H. Statz, The Properties of the Thirty-Two Point Groups, The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1963.

[11] http://global.oup.com/uk/orc/chemistry/qchem2e/student/tables/

[12] https://www.staff.ncl.ac.uk/j.p.goss/symmetry/index.html

[13] M. Miśkiewicz, Semiklasyczny i kwantowy opis ruchów rotora uogólnionego, Praca doktorska, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej, Lublin, 2006.

[14] D. Rosły, Rotor uogólniony i jego zastosowania, Praca doktorska, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej, Lublin, 2002.

[15] A. Góźdź, A. Szulerecka, A. Dobrowolski, Int. J. of Mod. Phys. E20 (2011) 565-568

[16] A. Góźdź, A. Szulerecka, A. Dobrowolski, J. Dudek, Int. J. of Mod. Phys. E20 (2011) 199-206

[17] A. Góźdź, A. Szulerecka, A. Dobrowolski, Acta Phys. Pol. B42 (2011) 459-463

[18] A. Góźdź, A. Szulerecka, A. Pędrak, Physics of Atomic Nuclei (2013) 76 1026-1032

[19] A. Dobrowolski, A. Góźdź, A. Szulerecka, Phys. Scr. 154 (2013) 014024

[20] A.Szulerecka, A.Dobrowolski, A.Góźdź, Phys. Scr. 89 (2014) 054033

[21] L. C. Biedenharn, J.D. Louck, Angular Momentum in Quantum Physics, Addison-Wesley, 1981.

[22] C. Eckart, Phys. Rev. 46 (1934) 383.

[23] C. Eckart, Phys. Rev. 47 (1935) 552.

[24] J. D. Louck, H. W. Galbraith, Rev. Mod. Phys. 48 (1976) 69.

[25] W. Zickendraht, Proc. Natl. Acad. Sci. 52 (1964) 1565.

[26] W. Zickendraht, Ann. Phys. 35 (1965) 18.

[27] W. Zickendraht, J. Math. Phys. 10 (1969) 30.

[28] W. Zickendraht, J. Math. Phys. 12 (1971) 1663.

[29] F. T. Smith, J. Math. Phys. 3 (1962) 735.

[30] R. C. Whitten, F. T. Smith, J. Math. Phys. 9 (1968) 1103.

[31] B. R. Johnson, J. Chem. Phys. 73 (1980) 5051.

[32] H. Klar, J. Math. Phys. 26 (1985) 1621.

[33] D. L. Knirk, J. Chem. Phys. 60 (1974) 66.

[34] B. Buck, L.C. Biedenharn, R.Y. Cusson, Nucl. Phys. A 317 (1979) 205.

[35] E. Karaśkiewicz, Zarys teorii wektorów i tensorów, PWN, 1971.

[36] A. Ya. Dzyublik, V. I. Ovcharenko, A. I. Steshenko, G. F. Filippov, Sov. J. Nucl. Phys. 15 (1972) 487.

[37] D. J. Rowe, G. Rosensteel, Ann. Phys. 126 (1980) 198.

[38] P. Gulshani, A. B. Volkov, J. Phys. A: Math. Gen. 15 (1982) 47.

[39] R. G. Littlejohn, K. A. Mitchell, Phys. Rev. A 58 (1998) 3705.

[40] R. G. Littlejohn, K. A. Mitchell, M. Reinsch, Phys. Rev. A 58 (1998) 3718.

[41] R. G. Littlejohn, M. Reinsch, Phys. Rev. A 52 (1995) 2035.

[42] R. G. Littlejohn, M. Reinsch, Rev. Mod. Phys. 69 (1997) 213.

[43] T. Iwai, J. Math. Phys. 28 (1987) 1315.

[44] O. Castaños, A. Frank, E. Chacón, P. Hess, M. Moshinsky, Phys. Rev. C 25 (1982) 1611.

[45] O. Castaños, A. Frank, E. Chacón, P. Hess, M. Moshinsky, J. Math. Phys. 23 (1982) 2537.

[46] J. M. Eisenberg, W. Greiner, Nuclear models: collective and single-particle phenomena, Amsterdam; London; North-Holland; New York; American Elsevier, 1970.

[47] M. K. Pal, Theory of nuclear structure, New York : Scientific and Academic Editions, 1983.

[48] L. Próchniak, S. G. Rohoziński J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 36 (2009) 123101.

[49] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, V. K. Khersonskii, Quantum theory of angular momentum, Singapore: World Scientific, 1989.

[50] A. Bohr, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 26 (1952) No 14.

[51] A. Bohr, B. Mottelson, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 27 (1953) No 16.

[52] J. M. Eisenberg, W. Greiner, Nuclear theory, vol. 1 Amsterdam; London; North-Holland; New York: American Elsevier, 1970.

[53] W. Greiner, J. A. Maruhn, Nuclear Models, Springer, 1996.

[54] P. Ring, P. Schuck, The Nuclear Many-Body Problem, Springer, 2004.

[55] D. J. Rowe, Muclear Collective Motion Models and Theory, World Scientific, 2010.

[56] A. Bohr, B. R. Mottelson, Struktura jądra atomowego, tom 1, PWN, 1975.

[57] notatki, prof. dr hab. A. Góźdź.

[58] A. I. Kostrikin, Wstęp do algebry, tom 3, PWN, 2005.

[59] https://encyklopedia.pwn.pl/haslo/twierdzenie-o-funkcji-odwrotnej;3990319.html

[60] G. M. Fichtenholz, Rachunek różniczkowy i całkowy, tom 1, PWN, Warszawa 1999.

[61] I.N. Bronsztejn, K.A. Siemiendiajew, Matematyka. Poradnik encyklopedyczny, PWN, Warszawa 1970

[62] S. Rohoziński, M. Gajda, W. Greiner, J. Phys. G: Nucl. Phys. 8 (1982) 787.

[63] P.O. Lipas, J.P.Davidson, Nucl. Phys. 26, (1961), 80.

[64] J.P.Davidson, Nucl. Phys. 33 (1962) 664.

[65] M.G. Davidson, Nucl. Phys. 69 (1965) 455.

[66] J.P. Davidson, Rev. Mod. Phys. 37 (1965) 105.

[67] I.Hamamoto, X. Zhang, H. Xie, Phys. Lett. B, 257 (1991) 1.

[68] J. Dudek, A. Góźdź, K. Mazurek, H. Moloque, J. Psych. G: Nucl. Part. Phys., 37 (2010) 064032.

[69] A. Góźdź, A. Dobrowolski, J. Dudek, K. Mazurek, Jnt. J. of Mod. Phys. E 19 (2010) 621.

[70] A. Góźdź, M. Miśkiewicz, J. Dudek, A. Dobrowolski, Jnt. J. of Mod. Phys. E 18 (2009) 1028.

[71] D. Curien, et al. Jnt. J. Mod. Phys. E 20 (2011) 219.

[72] A.Dobrowolski, A Góźdź, K. Mazurek, J. Dudek, Jnt. J. Mod. Phys. E 20 (2011) 500.

[73] N. Schunck, J. Dudek, A. Góźdź, P. H. Regan, Phys. Rev. C 69 (2004) 061305-1.

[74] A. Bohr, B. R. Mottelson, Struktura jądra atomowego, vol. 2, PWN, Warszawa 1984.

[75] M. E. Rose, Elementary theory of angular momentum, New York, John Wiley & Sons, 1957.

[76] http://www.nndc.bnl.gov/nudat2/chartNuc.jsp

[77] A. O. Barut, R. Rączka, Theory of group representations and applications, PWN, 1980.

[78] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, V. K. Khersonskii, Kvantovaja teorija uglovogo momenta, Nauka, 1975.

[79] R. Shankar, Mechanika kwantowa, PWN, Warszawa 2006

[80] http://www.ifj.edu.pl/dept/no2/nz22/articles.php?lng=p&pg=173